

FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS DA TERRA

# **Modelação Matemática da Caracterização da Contaminação de Terrenos e Análise de Risco**

Maria Luísa de Bragança

Dissertação apresentada à Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Geológica (Georrecursos)

Orientadora: Doutora Maria da Graça Azevedo de Brito

Monte da Caparica

Fevereiro 2010

## AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar gostaria de agradecer à Prof<sup>ª</sup> Doutora Maria da Graça Azevedo Brito, orientadora desta dissertação. Gostaria ainda de referir a sua excelente colaboração e orientação prestadas durante a realização do presente trabalho, como também a amizade e boa disposição.

Gostaria também de expressar um agradecimento à Administração do Grupo Empresarial Baía do Tejo e, em particular, ao Engenheiro Condinho de Araújo pela disponibilização dos dados utilizados no presente trabalho.

Um agradecimento à Faculdade de Ciências e Tecnologia, UNL, pela Bolsa de Investigação, e em particular ao CICEGe, Centro de Investigação em Ciência e Engenharia Geológica.

Gostaria ainda de agradecer ao Prof. Doutor José António Almeida pela disponibilidade e esclarecimento de algumas dúvidas que foram surgindo na modelação geoestatística.

Um agradecimento especial ao Paulo Caetano e à Mara Lopes pela companhia, amizade e boa disposição, durante a execução deste trabalho e estadia como bolseira no CICEGe.

Ao Fernando (Alves), pela incansável amizade durante todo este tempo (desde o primeiro dia em que lemos o Bizz Dizz...lembras-te?).

À Filipa (Matias) pela companhia, amizade e inquestionável ajuda, especialmente nesta recta final. Obrigado por todas as vezes em que fiquei em tua casa para trabalhar e também por a conversa em dia...

Ao João (Oliveira) pela companhia, amizade e companhia, nesta última fase em que estivemos juntos no CICEGe. Obrigado pela tua boa disposição.

Agradeço aos três, Fernando, Filipa e João, todas as noites de trabalho e todas as boleias de madrugada.

À Susana (Nunes) por termos atravessado grandes momentos de estudo e galhofa durante os últimos anos... Su, só tive pena de termos ido para mestrados diferentes....

Ao Filipe (Soares) pela amizade e por toda a disponibilidade e ajuda ao longo de todo o percurso académico. Sem dúvida, uma das pessoas que conheço que mais prontidão tem em ajudar.

A todos os meus amigos e colegas, que me acompanharam durante o percurso académico.

A todos aqueles que durante o meu percurso académico tiveram como apelido geral e comum a todos "...da minha aula...".

Gostaria ainda de agradecer a todos os meus colegas de trabalho, na Weber Portugal, pela simpatia, bom ambiente e pela força que me deram nesta etapa, em especial à Eng.<sup>a</sup> Madalena Presumido, pela disponibilidade e compreensão presentes mesmo na recta final.

Por fim, a todos lá em casa, por tudo e porque de alguma maneira contribuíram para a realização deste trabalho, e ainda, para eu ser quem sou. Obrigado por serem como são.

## RESUMO

O presente trabalho corresponde à Dissertação do Mestrado em Engenharia Geológica, na vertente de Georrecursos, e enquadra-se no domínio da engenharia geológica ambiental.

O estudo teve por objectivo a análise de resultados de dois métodos de modelação geoestatística distintos - estimação por *krigagem* e a *simulação sequencial* - para a avaliação do risco para a saúde de uma área contaminada, através de duas abordagens distintas: (i) estimação e simulação dos teores de um poluente e sua posterior transformação num valor de risco; (ii) estimação e simulação de uma variável binária - valores de risco - para a obtenção dos respectivos mapas de risco estimados/simulados.

Desenvolveu-se em três etapas principais: a primeira consistiu na análise estatística dos dados experimentais; a segunda, na aplicação das abordagens de modelação geoestatística; e uma terceira, para a avaliação dos resultados obtidos.

Na primeira etapa (análise estatística dos dados) foram estudados quatro elementos poluentes nos solos (o arsénio, o cobre, o chumbo e o zinco) e, dos quatro, seleccionou-se o zinco por se apresentar como sendo o elemento mais representativo na área de estudo. A segunda etapa consistiu:

- a) na estimação dos teores de zinco: (i) por *krigagem normal* (KN) e; (ii) por *simulação sequencial Gaussiana* (SSG). Em ambos os casos, os teores estimados/simulados foram posteriormente transformados em valores de risco e obtidos os respectivos mapas morfológicos de risco.
- b) na estimação/simulação da variável risco, utilizando o *formalismo da indicatriz*. Nesta abordagem foi realizada a estimação por *krigagem da indicatriz* (KI) e a *simulação sequencial da indicatriz* (SSI) de uma variável binária (*risco*) e obtidos os respectivos mapas morfológicos de risco.

Pela análise dos resultados obtidos concluiu-se que: (i) em termos gerais, para estudos de avaliação de áreas contaminadas e de risco para a saúde humana deverá ser utilizado o *formalismo da indicatriz*, qualquer que seja o método de inferência utilizado (estimação ou simulação); (ii) a utilização do método da *krigagem normal* não é um método adequado na medida em subestima as classes de valores extremos, ou seja, os teores considerados “contaminação/risco”, dando origem a áreas de risco menores do a realidade; (iii) por outro lado, e contrariamente às expectativas, também o método da SSG (*Simulação Sequencial Gaussiana*) não se apresenta como o mais adequado para estudos de identificação de “áreas contaminadas/não contaminadas” pois a distribuição das variáveis apresenta frequentemente

distribuições muito assimétricas, já que representam situações de concentração anómala dos poluentes; (iii) por último, conclui-se que ambos os métodos: KI (*krigagem da indicatriz*) e SSI (*simulação sequencial da indicatriz*), são adequados para a inferência da morfologia de zonas com teores/valores de risco acima de um determinado valor de referência, no entanto considera-se a KI como o método mais adequado por apresentar as áreas de risco com morfologia mais regular do que a SSI, o que numa fase posterior de descontaminação de terrenos, é mais vantajoso em termos de planeamento e operacionalidade na selecção das técnicas de remediação mais adequadas.

O estudo incidiu sobre uma antiga zona industrial, situada no Barreiro, distrito de Setúbal, onde desde o início do séc. XX foi desenvolvida actividade industrial diversa, estando presentemente sujeita a estudos de avaliação da contaminação e risco para futura requalificação urbana.

**Palavras-chave:** solo contaminado, avaliação de risco, mapas de risco; krigagem da indicatriz, simulação sequencial da indicatriz.

## ABSTRACT

This work corresponds to the Master's degree Thesis in Geological Engineering - Georesources, and was developed in the field of geoenvironmental engineering.

The study aimed to compare the application of two different geostatistical methods - *kriging* and *sequential simulation* - to assess the health risk of a contaminated area, using two different approaches: (i) a first approach, consisting in the estimation and simulation of pollutant grades and their subsequent transformation into risk values; (ii) a second approach, which uses the estimation and the simulation of a binary variable - risk values - to obtain the respective risk areas, for future remediation.

The methodology was developed in three stages: the first consisted on the statistical analysis of experimental data, the second corresponds to the application of the geostatistical models and the third, to the evaluation of the obtained results.

In the first stage (statistical analysis) four pollutant elements were studied (arsenic, copper, lead and zinc) and, from the four, zinc was selected as the most representative element in the industrial area. The second stage consisted of:

- a) the estimation of zinc concentration: (i) by *ordinary kriging* (KN) and (ii) by *sequential Gaussian simulation* (SSG). In both cases the estimated / simulated zinc grades were transformed into risk values and the respective risk areas were obtained;
- b) the estimation / simulation of a binary variable (risk) using the *indicator formalism*. In this approach (i) the *indicator kriging* (KI) method was used to map estimated risk areas and (ii) the *indicator sequential simulation* method (SSI) to create the respective morphological risk maps.

From the analysis of the results it could be concluded that: (i) in general terms, the *indicator formalism* should be used for characterization of contaminated areas and risk assessment, whatever the inference method used (estimation or simulation), (ii) *ordinary kriging* (KN) method does not seem to be an appropriate method for estimation of contaminated plumes as it underestimates the extent of the extreme values (contamination levels / risk) leading to reduction of the risk areas; (iii) on the other hand results achieved by SSG (*sequential Gaussian simulation*) did not correspond to the expectations, mainly because the distribution of these type of variables are usually very asymmetrical, as they represent situations of abnormal concentration of pollutants; (iii) finally, it could be concluded that both methods, KI (*indicator kriging*) and SSI (*sequential indicator simulation*) are the most appropriate methods for the morphological inference of risk areas or pollutant values above a certain threshold. However,

comparing the morphology of the respective maps, it is considered that KI is the most appropriate method for mapping risk areas because the shape of morphological plumes are more regular than the ones obtained with SSI, which result, in terms of operational costs, in a better scenario for future remediation planning.

The study focused on a former industrial area, located in Barreiro, Setubal district, where since the beginning of the XX century, diverse industrial activities were developed and which is presently subject to contamination studies for urban requalification.

**Keywords:** contaminated soil, risk assessment, risk maps, indicator kriging, sequential indicator simulation.

# ÍNDICE GERAL

1. INTRODUÇÃO .....	1
1.1. ENQUADRAMENTO DO TRABALHO, OBJECTIVOS E IMPORTÂNCIA .....	1
1.2. APRESENTAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO.....	2
1.2.1. Enquadramento Geológico Local.....	4
1.2.2. Apresentação dos Dados .....	5
1.2.3. Mobilidade e disponibilidade dos elementos químicos.....	7
2. METODOLOGIA .....	9
2.1. DESCRIÇÃO DAS FASES DA METODOLOGIA ADOPTADA.....	9
2.1.1. Fase 1: Tratamento e Análise Preliminar dos Dados.....	9
2.1.2. Fase 2: Aplicação das duas abordagens de modelação geoestatística .....	10
2.1.3. Fase 3: Comparação dos Mapas de Risco Cancerígeno .....	11
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS PARA A MODELAÇÃO MATEMÁTICA .....	13
3.1. BREVE INTRODUÇÃO À GEOESTATÍSTICA .....	13
3.2. GEOESTATÍSTICA APLICADA AO CASO DE ESTUDO .....	14
3.2.1. Estudo das Variáveis – Variografia.....	15
3.2.2. Estimção Geoestatística.....	18
3.2.3. Simulação Geoestatística.....	20
4. FUNDAMENTOS TEÓRICOS PARA A AVALIAÇÃO DE RISCO .....	26
4.1. MODELO CONCEPTUAL .....	26
4.2. CARACTERIZAÇÃO DA FONTE, DO TRAJECTO E DO ALVO DE CONTAMINAÇÃO .....	27
4.3. AVALIAÇÃO DA CONTAMINAÇÃO, ANÁLISE DE RISCO E PLANO DE DESCONTAMINAÇÃO .....	27
4.3.1. Etapa 1: Avaliação da Contaminação dos Terrenos .....	28
4.3.2. Etapa 2: Análise de Risco.....	29
4.3.3. Plano de Descontaminação.....	36
5. CASO DE ESTUDO .....	38
5.1. TRATAMENTO PRELIMINAR E ANÁLISE UNIVARIADA DOS DADOS.....	38
5.1.1. Análise da Distribuição e Estatísticos básicos das Variáveis.....	38
5.1.2. Distribuição da Variável Cobre nos Níveis diferentes níveis.....	42
5.1.3. Distribuição da Variável Chumbo nos diferentes níveis .....	45
5.1.4. Distribuição da Variável Zinco nos diferentes níveis.....	48



5.2. ESTUDO DAS VARIÁVEIS: VARIOGRAFIA .....	51
5.2.1. Arsénio .....	52
5.2.2. Cobre .....	52
5.2.3. Chumbo .....	53
5.2.4. Zinco .....	54
5.3. APLICAÇÃO DAS DUAS ABORDAGENS DE MODELAÇÃO GEOESTATÍSTICA .....	55
5.3.1. Primeira Abordagem – Estimação/Simulação de Teores de Zinco .....	55
5.3.2. Segunda Abordagem – Estimação/Simulação de índices de Risco .....	68
6. COMPARAÇÃO DE RESULTADOS .....	78
7. CONCLUSÕES .....	81
8. BIBLIOGRAFIA .....	83
APÊNDICES	

# ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 – Localização da zona 2.....	3
Figura 1.2 – Extracto da carta Geológica de Portugal, folha 34 – D.....	5
Figura 1.3 – Localização das amostras recolhidas na área de estudo (Zona 2).....	6
Figura 2.1 – Organograma da metodologia de estudo.....	12
Figura 3.1 – Função variograma e covariância ( <i>adaptado de: SOARES, 2000</i> ). ....	16
Figura 5.1 – Continuidade espacial do Arsénio nos três níveis A, B e C.....	52
Figura 5.2 – Continuidade espacial do Cobre nos três níveis A, B e C.....	52
Figura 5.3 – Continuidade espacial do Chumbo nos três níveis A, B e C.....	53
Figura 5.4 – Continuidade espacial do Zinco para os três níveis A, B e C. ....	54
Figura 5.5 – Variograma, Histograma e Função Distribuição da variável Zinco no nível A.....	55
Figura 5.6 – Teores de zinco estimados por krigagem normal.....	56
Figura 5.7 – Transformação dos teores estimados em valores de risco cancerígeno (RC). ....	58
Figura 5.8 – Mapa de risco cancerígeno (RC) – Estimação por krigagem normal. ....	59
Figura 5.9 – Teores simulados de zinco (SSG - 100).....	60
Figura 5.10 – Teores simulados de zinco (SSG - 500).....	60
Figura 5.11 – Variograma SSG – 100. ....	61
Figura 5.12 – Variograma da SSG – 500. ....	61
Figura 5.13 – Histograma da SSG 100.....	61
Figura 5.14 – Histograma da SSG 500.....	61
Figura 5.15 – Box-plot da média das 500 SSG. ....	62
Figura 5.16 – Box-plot da variância das 500 SSG. ....	62
Figura 5.17 – Média dos teores simulados de zinco – simulação sequencial gaussiana. ....	63
Figura 5.18 – Transformação dos teores simulados em valores de risco cancerígeno – SSG 100. .....	65
Figura 5.19 – Transformação dos teores simulados em valores de risco cancerígeno – SSG 500. .....	65
Figura 5.20 – Mapa de risco cancerígeno – SSG 100. ....	66
Figura 5.21 – Mapa de risco cancerígeno – SSG 500. ....	66
Figura 5.22 – Mapa de probabilidades de risco cancerígeno (RC) – simulação sequencial gaussiana. ....	67
Figura 5.23 – Mapa de risco cancerígeno – simulação sequencial gaussiana. ....	67
Figura 5.24 – Histograma e distribuição espacial da variável risco cancerígeno.....	69
Figura 5.25 – Variograma da variável indicatriz do risco cancerígeno.....	70
Figura 5.26 – Mapa de probabilidades de risco cancerígeno (RC) – krigagem da indicatriz. ....	71

---

Figura 5.27 – Estatísticos da KI .....	71
Figura 5.28 – Mapa de risco cancerígeno – krigagem da indicatriz.....	72
Figura 5.29 – Histograma dos dados binarizados.....	72
Figura 5.30 – Histograma dos valores de risco estimados. ....	72
Figura 5.31 – Mapa de risco cancerígeno – SSI 100.....	73
Figura 5.32 – Mapa de risco cancerígeno – SSI 500.....	73
Figura 5.33 – Variograma do SSI 100.....	74
Figura 5.34 – Variograma do SSI 100.....	74
Figura 5.35 – Box-plot das médias das 500 SSI.....	75
Figura 5.36 – Box-plot das variâncias das 500 SSI.....	75
Figura 5.37 – Mapa da probabilidade de risco cancerígeno (RC) – simulação sequencial da indicatriz.....	76
Figura 5.38 – Mapa de risco cancerígeno – simulação sequencial da indicatriz.....	76
Figura 5.39 – Histograma dos valores reais de risco.....	77
Figura 5.40 – Histograma do mapa final de risco (SSI).....	77
Figura 6.1 – Mapa de risco cancerígeno (KI).....	79
Figura 6.2 – Mapa de risco cancerígeno (SSG).....	79
Figura 6.3 – Mapa final de risco cancerígeno (KI). ....	79
Figura 6.4 – Mapa final de risco cancerígeno (SSI).....	79
Figura 6.5 – Morfologia das áreas de risco (KI). ....	80
Figura 6.6 – Morfologia das áreas de risco (SSI).....	80

## ÍNDICE DE QUADROS

Quadro 5.1– Valores de referência estabelecidos pela norma canadiana de Ontário (OMEE, 1997) (Tabela A do Apêndice 2: <i>Surface soil groundwater criteria for a potable ground water condition (A9)</i> ). .....	38
Quadro 5.2 – Estatísticos Básicos dos elementos químicos nos horizontes A, B e C.....	51
Quadro 5.3 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Arsénio.....	52
Quadro 5.4 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Cobre.....	53
Quadro 5.5 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Chumbo.....	53
Quadro 5.6 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Zinco. ....	54
Quadro 5.7 – Características da malha utilizada. ....	55
Quadro 5.8 – Estatísticos básicos dos teores estimados. ....	57
Quadro 5.9 – Estatísticos básicos dos valores de risco das amostras e do mapa obtido por KN. ....	59
Quadro 5.10 – Proporções dos dados experimentais e das simulações (SSG).....	62
Quadro 5.11 – Estatísticos básicos dos cenários 100 e 500 efectuados por SSG.....	62
Quadro 5.13– Estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos valores de risco das amostras e do mapa obtido (SSG).....	68
Quadro 5.14 – Estatísticos básicos dos valores estimados (KI). ....	71
Quadro 5.15 – Estatísticos básicos dos valores de risco estimados. ....	73
Quadro 5.16 – Verificação das proporções de cada classe entre os dados experimentais e as simulações sequenciais da indicatriz.....	74
Quadro 5.17– Comparação de estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos dados reais transformados em risco do mapa obtido da simulação sequencial da indicatriz..	77
Quadro 6.1 – Estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos mapas obtidos.....	78

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1.1 – Registo Histórico das actividades industriais na Zona 2. ....	4
Tabela 4.1– Classificação das substâncias poluentes (fonte: <i>USEPA</i> ).....	30
Tabela 5.1 – Valores utilizados para o cálculo do risco cancerígeno e perigosidade ou risco não cancerígeno estabelecidos pela USEPA. ....	57

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1. ENQUADRAMENTO DO TRABALHO, OBJECTIVOS E IMPORTÂNCIA

No âmbito do Mestrado em Engenharia Geológica na vertente de Georrecursos, o tema desta dissertação enquadra-se no domínio da engenharia geológica ambiental e pressupõe execução de duas abordagens de modelação geoestatística distintas, nomeadamente a Estimação e a Simulação, com o objectivo de efectuar a caracterização da contaminação de solos e respectiva avaliação de risco para a saúde humana.

Tenciona-se, também, identificar as vantagens e desvantagens que as duas abordagens de modelação geoestatística apresentam na avaliação da análise de risco. Este tipo de estudo permite obter resultados que possibilitam a avaliação da extensão e do tipo de contaminação de uma determinada área, tendo como objectivo auxiliar a tomada de decisões quanto às acções de remediação a serem implementadas na sua requalificação.

Pode-se considerar que a análise de risco para a saúde humana destina-se a estimar a possibilidade de ocorrência de um efeito nefasto para a saúde a partir da exposição ambiental de determinadas substâncias químicas (BRITO, 2005).

A escolha do tema deste trabalho incidiu basicamente sobre três factores. Em primeiro lugar, a problemática actual da contaminação de solos em termos ambientais, tanto para os ecossistemas como para a saúde humana, reflectiu-se numa enorme vontade de aprofundar este tema.

Em segundo lugar, o facto de ser um tema actual e com uma componente teórico-prática bastante vasta, pois para um estudo adequado é necessário, não só o conhecimento do histórico da área, o modelo potencial de contaminação, o modelo geológico e hidrogeológico como o domínio das ferramentas de modelação geoestatística e análise de risco para o tratamento e análise da informação recolhida, de forma a quantificar a magnitude e extensão do problema para posterior mitigação. Desta forma propõe-se, no presente trabalho, aprofundar esta temática com vista a comparar as semelhanças ou dissemelhanças obtidas nos resultados da aplicação dos diferentes métodos da geoestatística.

Em terceiro lugar, a escolha deste tema serviu também para aprofundar os aspectos inerentes a uma avaliação da contaminação, os factores que têm de ser levados em conta, e ainda, a obtenção de uma melhor capacidade de manuseamento das ferramentas teórico-práticas necessárias para se efectuar um estudo adequado.

A combinação destes três factores, resultou numa preocupação com a problemática ambiental, num conhecimento mais profundo deste tema, e numa perspectiva de ser possível a resolução dos problemas ambientais existentes, de acordo com as tecnologias disponíveis.

Não basta estarmos preocupados com a problemática ambiental existente, tanto em Portugal como no mundo. Há que pensar que somos capazes de resolver muitos dos problemas que surgem. Temos que ter um sentimento crítico positivo aos problemas ambientais que nos rodeiam.

Entenda-se por solo, do ponto de vista geológico, a ocorrência natural de terrenos brandos ou moles que cobrem um estrato rochoso e que resulta de desintegração e decomposição química e/ou física da rocha-mãe, podendo ou não conter matéria orgânica (COSTA, 2007).

A contaminação de solo ocorre quando este apresenta adições de compostos que modificam e alteram as características naturais do mesmo, colocando em risco tanto a saúde pública como o ecossistema. Define-se assim, solo contaminado, quando este apresenta concentrações de determinados compostos provenientes de processos não naturais e que excedem os valores de referência estipulados por legislação específica.

A elevada taxa de imprudência, no que diz respeito a características ambientais, que se verificou no passado, é altamente “paga” nos dias de hoje. A ausência de políticas ambientais sustentáveis traduz-se, nos dias que correm, em graves problemas ambientais, tanto para os ecossistemas como para a saúde pública. Dado o elevado desenvolvimento sócio-económico e físico-urbanístico e a problemática ambiental actual é imperativo a remediação e reabilitação de áreas não aptas para esse desenvolvimento devido a problemas de contaminação de solos e de águas tanto superficiais como subterrâneas.

## **1.2. APRESENTAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO**

A área de estudo, denominada por zona 2, tem uma extensão de cerca de 66 ha e localiza-se no Parque Empresarial do Barreiro (PEB) (um dos parques empresariais do Grupo Baía do Tejo), que ocupa uma superfície de cerca de 230 ha e para o qual existe uma proposta de intervenção urbanística com o objectivo de requalificar o território dando nova centralidade e acessibilidades à cidade do Barreiro. Como resultado, são propostas transformações nas utilizações actuais do solo, nomeadamente a utilização de parte deste território para a instalação de zonas habitacionais e de serviços.

A reconversão do PEB para novos usos levou (desde 2003) à realização de estudos para avaliação da contaminação e descontaminação dos terrenos de acordo com a sua ocupação e uso

futuro, tendo sido concluído em 2004 o estudo referente à zona 1 do PEB, com cerca de 30 ha de terreno e em 2005 o estudo referente à zona 2, que abrangeu uma área de cerca de 70 ha.

A Figura 1.1 apresenta a localização da área de estudo.



**Figura 1.1 – Localização da zona 2.**

Actualmente encontra-se em fase de estudo para avaliação do estado de contaminação dos solos e águas subterrâneas e respectiva elaboração do plano de descontaminação dos terrenos, uma área mais abrangente do PEB (com cerca de 180 ha) que integra não apenas as zonas 1 e 2, como também as restantes áreas do PEB (zonas 3, 4 e 5).

A actividade industrial da zona 2 surge no início em 1928 com a implantação de unidades fabris para a produção de têxteis, oficinas de tinturaria, oficinas de manutenção e reparação de maquinaria e viaturas, fábricas de pesticidas, fábrica para o processamento de enxofre e fabrico de sulfato de amónio, unidades de fundição do ferro e metalomecânica, armazéns, oficinas, carpintarias e laboratórios.

Como consequência destas actividades poderão ter ocorrido no solo derrames e acumulação de substâncias químicas (derivadas das matérias primas utilizadas e produtos / subprodutos industriais), que apresentam risco para a saúde e para o ecossistema.

Com vista a inferir sobre os contaminantes expectáveis nos solos e águas subterrâneas, apresentam-se na Tabela 1.1 um resumo das principais actividades, matérias-primas utilizadas e fontes de contaminação existentes na área em estudo.

Tabela 1.1 – Registo Histórico das actividades industriais na zona 2.

Actividade	Principais Matérias-primas	Fontes de Contaminação
<b>Produção de Enxofres, Zineb e Pesticidas</b>	Enxofre e ingredientes activos de Pesticidas, Solventes e águas	Descargas de águas e solventes de lavagem contaminados com pesticidas
<b>Construção Metalomecânica</b>	Aço Laminado, Lingotes e sucatas	Descargas de solventes, diluentes e óleos
<b>Manutenção e Reparação</b>	-	Perdas de confinamento de combustíveis; Descargas de solventes, diluentes, óleos e águas oleosas
<b>Deposição de Resíduos (Poeiras dos EFQ)</b>	-	Lixiviação dos resíduos
<b>Produção de têxteis a partir de fibras naturais</b>	Juta, Sisal, Algodão, Lã, Cairo	Descargas de creosoto, tintas e solventes
<b>Produção de têxteis a partir de materiais sintéticos</b>	PP, PE e PVC	Descargas de tintas e solventes
<b>Produção de Energia</b>	Diesel Oil	Perdas de confinamento de <i>diesel oil</i> Descargas de óleos de transformadores, contendo PCB's
<b>Produção de Sulfato de Amónio</b>	Amoníaco; Ácido Sulfúrico	Perdas de confinamento de ácido sulfúrico e águas mãe
<b>Construção metálica</b>	Aço laminado, lingotes e sucatas	Descargas de óleos solventes e diluentes
<b>Armazenagem de hexana</b>	-	Perda de confinamento de hexana
<b>Produção de Energia</b>	Vapor de água	Descargas de óleos de transformadores, contendo PCB's
<b>Descarga de águas residuais</b>	-	Infiltração no solo de águas contendo óleos e gorduras
<b>Deposição de Resíduos</b>	-	Lixiviação dos resíduos
<b>Produção de tintas e vernizes</b>	Pigmentos Solventes	Descargas de águas e solventes de lavagem
<b>Produção de Fibra de Vidro</b>	Areia, caulinos, calcários	-
<b>Deposição de Resíduos</b>	-	Lixiviação de resíduos

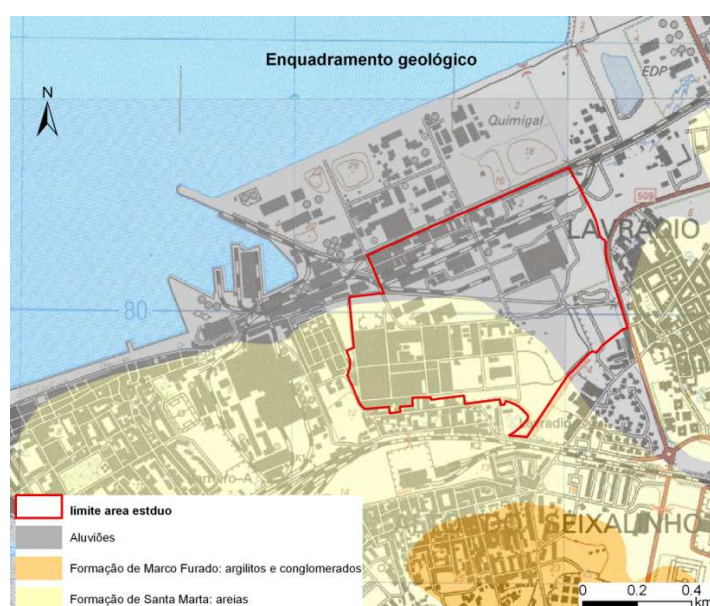
### 1.2.1. ENQUADRAMENTO GEOLÓGICO LOCAL

Na cartografia geológica de Portugal, a área de estudo está representada na folha 34 – D e as formações que afloram nesta área são (Figura 1.2):



**a** - Formação datada do Holocénico constituída por aluviões e/ou aterros. Esta formação está largamente representada na Península de Setúbal. Estas areias são predominantemente grosseiras e os aterros são de composição variada.

**P<sub>SM</sub>** - Formação datada do Pliocénico designada por Formação de Santa Marta. Assim como a formação descrita anteriormente, esta também está bem representada na Península de Setúbal. Constituída por conglomeradas pouco espessos descontínuos na sua base, passando a areias mais ou menos finas, podendo estas conter pequenas a médias porções de argilas (caulinite e ilitite).



**Figura 1.2 – Extracto da carta Geológica de Portugal, folha 34 – D.**

A necessidade de ampliar o território fez com que, desde os anos 40, esta área sofresse grandes alterações geomorfológicas, com a deposição de variados tipos de materiais, com diferentes proveniências, no rio Tejo. Assim sendo, existe uma alteração na geologia local que modifica de modo significativo a área.

### 1.2.2. APRESENTAÇÃO DOS DADOS

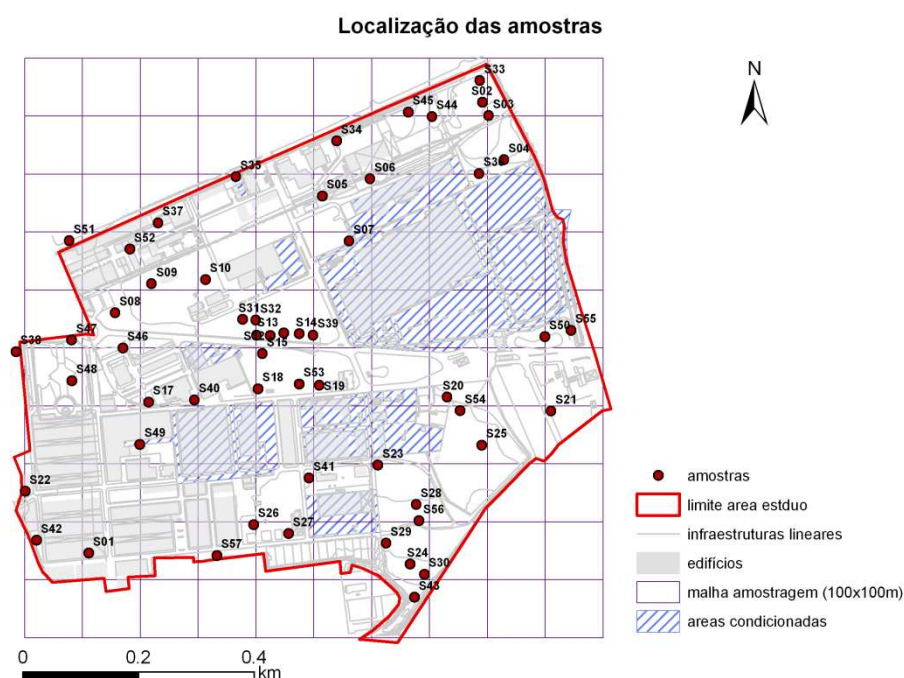
Os estudos já realizados na zona 2 permitiram a caracterização do local, a definição prévia dos locais potencialmente contaminados e não contaminados e, ainda, a identificação dos potenciais contaminantes a estudar. De acordo com esses estudos, identificaram-se como principais potenciais contaminantes os seguintes elementos/compostos:

- Ag, As, Ba, Be, Cd, Co, Cr<sub>total</sub>, Cr<sub>VI</sub>, Cu, Hg, Mo, Na, Ni, Pb, Sb, Se, TPH's, V, Zn, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e NH<sub>4</sub><sup>+</sup> e pesticidas.

As amostras de solo foram recolhidas com recurso a uma máquina hidráulica giratória de rodas, em 3 níveis na zona não saturada do solo, nomeadamente,

- Nível A: para profundidades  $\leq 1,5\text{m}$  foram recolhidas 56 amostras;
- Nível B: para profundidades  $> 1,5\text{m}$  e  $\leq 3\text{m}$  foram recolhidas 77 amostras;
- Nível C: para profundidades  $> 3\text{m}$  e  $\leq 4,5\text{m}$  foram recolhidas 35 amostras.

Para se obter a concentração dos poluentes no solo, as amostras foram submetidas a ensaios analíticos pelo método de varrimento *TerrAttest*<sup>®</sup>. Para o presente trabalho escolheram-se apenas 4 elementos químicos, o Arsénio (As), o Cobre (Cu), o Chumbo (Pb) e o Zinco (Zn) por apresentarem maior representatividade na área. Na Figura 1.3 apresenta-se a localização das amostras recolhidas na área de estudo.



**Figura 1.3 – Localização das amostras recolhidas na área de estudo (Zona 2).**

As concentrações para cada um dos elementos apresentam-se nos APÊNDICES I A, I B e I C, correspondentes aos níveis A, B e C, respectivamente, onde as células assinaladas a azul representam as concentrações acima do valor de referência estabelecido pela norma canadiana de Ontário.

### 1.2.3. MOBILIDADE E DISPONIBILIDADE DOS ELEMENTOS QUÍMICOS

A ocorrência de elementos químicos na natureza pode ser natural ou antropogénica. Associadas ao tipo de ocorrência de elementos químicos que ocorrem na natureza estão a disponibilidade e mobilidade desses mesmos elementos. Assim, importa referir que a mobilidade dos elementos químicos pode ocorrer em ambiente primário (rochas, mineralizações, etc) ou secundário (solos, águas, sedimentos, etc) (GRIMES *et al.*, 1994 *in* BAPTISTA, 2003).

Neste caso de estudo, torna-se importante perceber de que modo o As, Cu, Pb e Zn estão disponíveis e como ocorre a sua mobilização. Poder-se-á referir que a ocorrência destes elementos na área de estudo é essencialmente antropogénica, assim sendo importa estudar a disponibilidade e mobilidade em ambiente secundário.

O As em ambiente secundário tem mobilidade mais fraca do que em ambiente secundário e dá-se em ambientes oxidantes (LEVINSON, 1980 *in* BAPTISTA, 2003). Os principais factores que afectam a disponibilidade e a mobilidade do As podem ser divididos em três grandes grupos, os factores inerentes ao solo, os factores resultantes das práticas agrícolas e os factores inerentes às plantas. Assim sendo, importa salientar para este caso de estudo, os factores inerentes ao solo (KABATA-PENDIAS *et al.*, 1985 *in* BAPTISTA, 2003), nomeadamente: o pH, a presença de óxidos e hidróxidos de Fe a Al que absorvem facilmente o As, a textura do solo e os minerais argilosos, onde a mobilidade e disponibilidade do As é maior em solos arenosos que argilosos, pois estes contêm naturalmente mais óxidos e hidróxidos de Fe a Al, e o potencial redox, pois quanto mais redutor for o meio menor será a mobilidade e disponibilidade do As.

O Cu possui, à semelhança do elemento anterior, uma disponibilidade e uma mobilidade diferente em ambiente primário e ambiente secundário (KABATA-PENDIAS *et al.*, 1985 *in* BAPTISTA, 2003). Os processos que controlam a fixação do cobre nos solos são, segundo (KABATA-PENDIAS *et al.*, 1985 *in* BAPTISTA, 2003) a adsorção, a coprecipitação, a complexação orgânica e a fixação microbiana, que podem ainda ser controlados pelo pH. O Cu é um elemento com pouca mobilidade nos solos, no entanto, em solos com baixo teor em matéria orgânica essa mobilidade pode ocorrer com alguma importância. Este elemento tende a acumular-se em solos superficiais devido, por exemplo, a gases industriais que circulam no ar e que transportam os metais, vindo estes posteriormente a depositar-se (ADRIANO, 1986, *in* BAPTISTA, 2003).

O Pb possui, como principais origens nos solos, a intervenção humana através da actividade mineira e a utilização de pesticidas e fertilizantes nas práticas agrícolas. Em áreas poluídas este elemento pode apresentar elevadas concentrações nos solos, principalmente nas camadas superficiais (KABATA-PENDIAS *et al.*, 1985 *in* BAPTISTA, 2003). A mobilidade deste elemento no ambiente secundário é baixa na maioria dos ambientes oxidantes sendo imóvel em

ambiente redutor, pois esta normalmente contido em sulfuretos. Os factores que afectam a mobilidade e a disponibilidade do Pb nos solos são (ADRIANO, 1986 *in* BAPTISTA, 2003) a textura do solo, nomeadamente a fracção argilosa, que aumenta a disponibilidade do Pb pois possui um maior número de locais de troca catiónica, o pH, a presença de matéria orgânica e ainda, as plantas que inibem a mobilidade do elemento.

O Zn é o elemento, de todos os aqui mencionados, que apresenta maior disponibilidade e mobilidade em ambiente secundário (LEVINSON, 1980 *in* BAPTISTA, 2003). Os principais factores que controlam a disponibilidade e mobilidade deste elemento nos solos são o pH, que controla fortemente a retenção do elemento nos solos e os óxidos de Fe e Mg, que aumentam a disponibilidade do elemento devido à facilidade que estes possuem em fixar o zinco (KABATA-PENDIAS *et al.*, 1985 *in* BAPTISTA, 2003).

Esta breve análise efectuada à disponibilidade e mobilidade dos elementos químicos em estudo, permite averiguar e perceber o comportamento dos mesmos nos horizontes de solo em estudo.

## 2. METODOLOGIA

De acordo com os objectivos propostos para o presente trabalho, a metodologia desenvolvida considera a integração de duas abordagens distintas de modelação matemática, possíveis de serem utilizados para a obtenção da caracterização da contaminação de solos e, ainda, os factores que dizem respeito à análise de risco para a saúde humana.

Cada abordagem foi desenvolvida de duas formas distintas. Numa primeira fase foram considerados como dados de partida os teores reais de Zn, sendo a variável contínua e, a partir destes, efectuou-se a estimação por krigagem normal e a simulação sequencial gaussiana. Numa segunda fase foram considerados como dados de partida valores de risco cancerígeno (variável binária) e, a partir destes, efectuou-se a estimação por krigagem da indicatriz e a simulação sequencial da indicatriz.

### 2.1. DESCRIÇÃO DAS FASES DA METODOLOGIA ADOPTADA

#### 2.1.1. FASE 1: TRATAMENTO E ANÁLISE PRELIMINAR DOS DADOS

Efectuou-se o tratamento e análise preliminar dos dados experimentais. Foram seleccionados 4 elementos químicos o As, Cu, Pb e Zn. Ainda nesta etapa efectuou-se uma análise univariada dos dados, em que o objectivo incidiu na análise isolada de cada uma das variáveis. Esta análise proporciona uma visão global de cada variável numa perspectiva puramente descritiva. Com a descrição univariada de uma variável, pretende-se ter uma ideia da sua dispersão, onde os estatísticos básicos resumem medidas de localização da distribuição de uma variável.

De seguida efectuou-se o estudo variográfico de cada variável e respectivo ajuste de um modelo teórico que melhor defina a distribuição e respectiva correlação presente em cada variável. Após este estudo, seleccionou-se o zinco por ser o elemento que apresenta melhor representatividade. O facto de este elemento apresentar apenas uma amostra com teor acima do limite de referência também se tornou numa das razões para a sua selecção, com o objectivo de se verificar a importância que os limites de referência possuem neste tipo de estudos.

**2.1.2. FASE 2: APLICAÇÃO DAS DUAS ABORDAGENS DE MODELAÇÃO GEOESTATÍSTICA**

Seguidamente descreve-se, de um modo sucinto, a metodologia adoptada no presente trabalho.

**2.1.2.1. KRIGAGEM NORMAL (KN)**

1. Estimaco de teores de zinco atravs do estimador geoestatstico (KN);
2. Clculo do risco cancergeno e do risco no cancergeno (perigosidade)
3. Binarizao dos mapas de risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade);
4. Mapa final de risco cancergeno.

**2.1.2.2. SIMULAO SEQUENCIAL GAUSSIANA (SSG)**

1. Simulao sequencial gaussiana dos teores de zinco e obteno de 500 cenrios equiprovveis de teores simulados de zinco;
2. Clculo do risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade);
3. Binarizao dos mapas de risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade);
4. Clculo do mapa mdio de risco cancergeno a partir da mdia dos 500 mapas binrios de risco cancergeno, obtendo-se um mapa de probabilidades de risco cancergeno;
5. Binarizao do mapa de probabilidade num mapa binrio de risco cancergeno;
6. Mapa final de risco cancergeno.

**2.1.2.3. KRIGAGEM DA INDICATRIZ (KI)**

1. Clculo do risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade) das amostras;
2. Binarizao do risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade);
3. Estimaco do risco cancergeno atravs do estimador geoestatstico (KI), obtendo-se um mapa de probabilidade de risco cancergeno;
4. Binarizao do mapa de probabilidade de risco cancergeno;
5. Mapa final de risco cancergeno.

**2.1.2.4. SIMULAO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ (SSI)**

1. Clculo do risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade) das amostras;
2. Simulao sequencial da indicatriz do risco cancergeno/risco no cancergeno (perigosidade) e obteno de 500 cenrios equiprovveis de risco cancergeno e 500 cenrios equiprovveis de risco no cancergeno (perigosidade).
3. Clculo do mapa mdio de risco cancergeno a partir dos 500 mapas binrios de risco cancergeno, obtendo-se um mapa de probabilidade de risco cancergeno.

4. Binarização do mapa de probabilidade num mapa binário de risco cancerígeno;
5. Mapa final de risco cancerígeno.

### **2.1.3. FASE 3: COMPARAÇÃO DOS MAPAS DE RISCO CANCERÍGENO**

Nesta fase pretendeu-se efectuar a comparação entre os 4 mapas de risco cancerígeno obtidos na fase anterior. Assim, pretende-se analisar as semelhanças e as dissemelhanças entre cada um dos métodos de modelação geoestatística, com o objectivo de concluir qual dos métodos se adequa melhor, quando se pretende efectuar uma avaliação do risco cancerígeno numa determinada área de estudo.

O organograma que se segue (Figura 2.1), ilustra as várias etapas que cada uma das abordagens efectuadas envolve.

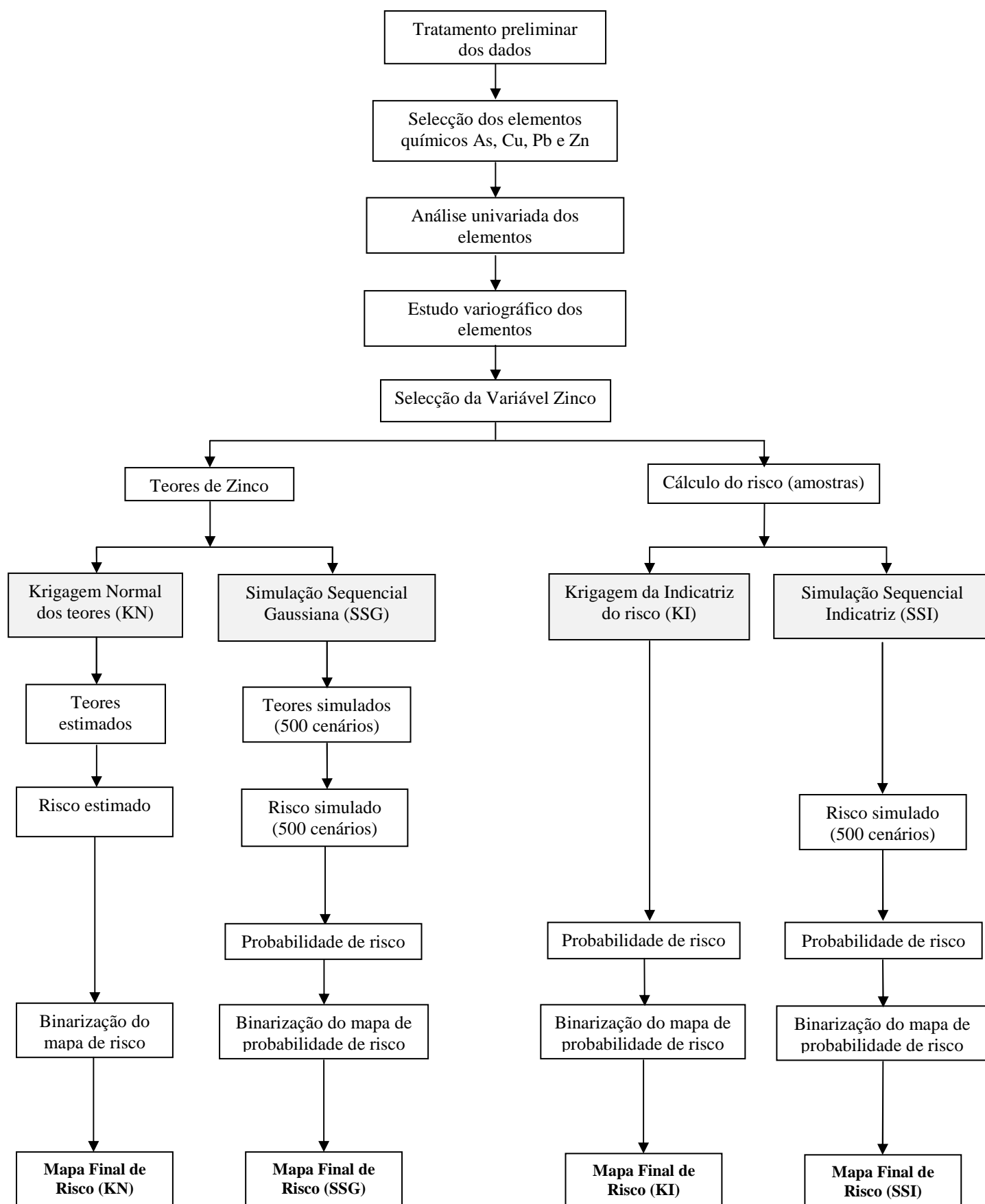


Figura 2.1 – Organograma da metodologia de estudo.



## 3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS PARA A MODELAÇÃO MATEMÁTICA

### 3.1. BREVE INTRODUÇÃO À GEOESTATÍSTICA

Os fenómenos espaciais das ciências da terra e do ambiente apresentam especificidades que normalmente os distinguem dos demais passíveis de modelização matemática e física.

A geoestatística surge nos anos 60, essencialmente, da necessidade da modelização de recursos geológicos e tem por objectivo a caracterização da dispersão espacial e espaço-temporal das grandezas que definem a quantidade e qualidade desses mesmos recursos naturais.

Assenta em modelos probabilísticos, que tomam em consideração a estrutura do fenómeno, ou seja, modelos topo-probabilísticos. Estes modelos têm por objectivo, não só o conhecimento do comportamento espacial e/ou temporal dos fenómenos no meio em que estes ocorrem, como também a quantificação da incerteza associada ao conhecimento desses mesmos fenómenos (JOURNAL, 1978; ISAACS, 1989; GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000).

O campo de aplicação actual desta disciplina estende-se a diversos domínios das Ciências da Terra, nomeadamente: na modelação da geometria de recursos geológicos (MATIAS, 2010), na exploração de recursos geológicos não metálicos (MUGE *et al*, 1993; PEREIRA *et al*, 1994) na área dos petróleos (ALMEIDA, 1999), em áreas da engenharia geotécnica (PEREIRA *et al*, 1992,1997; BRITO *et al*, 1996) e, em particular, nos vários domínios relacionados com o ambiente, tais como: na avaliação da qualidade do ar e climatologia (DURÃO *et al* 2009, MESQUITA & SOUSA 2009), qualidade da água (RIBEIRO & MUGE, 1989), caracterização da dispersão de poluentes e análise de risco (PEREIRA *et al*, 2001; [http://cerena.ist.utl.pt/cerena\\_nb/handle\\_pubs\\_pessoais.php?nome\\_pub=A.R.&apelido\\_pub=Salgueiro](http://cerena.ist.utl.pt/cerena_nb/handle_pubs_pessoais.php?nome_pub=A.R.&apelido_pub=Salgueiro)BRITO, 2005; BRITO *et al*, 2007; VENDAS *et al*, 2007;) e também na estimação da distribuição espacial de biótopos (ALMEIDA *et al*, 2004).

Existem vários tipos de modelos, nomeadamente, os modelos físicos deterministas, os modelos deterministas de inferência espacial e os modelos probabilistas ou estocásticos.

Os modelos deterministas baseiam-se no conhecimento das leis que regem o comportamento dos fenómenos físicos e permitem a descrição da realidade com base na resolução de equações da física, da química, (e outras), de forma a reproduzir o comportamento das variáveis no sistema. Estes modelos, muitas vezes complexos e difíceis de implementar, têm por objectivo representar o comportamento dos fenómenos físicos através do conjunto dos factores que estão na sua origem.

Os modelos deterministas de inferência espacial, mais simples que os anteriores, têm por objectivo a interpolação espacial dos valores observados. Calculam, no espaço, o valor de uma determinada grandeza com base na combinação linear dos valores observados e têm por base critérios geométricos para a determinação da influência de cada amostra ao valor estimado (exemplo: o método dos polígonos de influência, o método de triangulação e o método do inverso da potência).

Os modelos probabilistas ou estocásticos, ao contrário dos deterministas, além de permitirem o conhecimento do comportamento espacial e/ou temporal dos fenómenos no meio em que estes ocorrem, permitem a caracterização da incerteza associada ao fenómeno estimado.

A geoestatística reúne ferramentas, que quantificam a continuidade espacial da grandeza em estudo, modelos de interpolação espacial tendo por base a sua variabilidade estrutural e modelos de simulação estocástica que quantificam a incerteza ligada ao fenómeno espacial (ISAACS & SRIVASTAVA, 1989; JOURNAL, 1993; GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000).

No caso concreto da presente dissertação, a geoestatística assume um papel fundamental para a modelação espacial de teores de contaminantes e para a análise do risco.

### **3.2. GEOESTATÍSTICA APLICADA AO CASO DE ESTUDO**

A contaminação de solos pode ser considerada um fenómeno que se distribui espacialmente de um modo não aleatório. No entanto, o meio envolvente (o solo) pode ser de tal modo heterogéneo, que torna o fenómeno espacial (contaminação) estruturado.

Outra característica inerente a um estudo de contaminação de solos é que, normalmente, a quantidade de informação disponível (amostras) é escassa, o que implica uma certa ideia de incerteza face ao conhecimento global do fenómeno espacial. Esta incerteza resulta não só da escassez de informação como também do maior ou menor grau de aleatoriedade do fenómeno espacial.

Estas duas características intrínsecas na modelação de uma contaminação implicam que o estudo geoestatístico seja efectuado com base em modelos matemáticos probabilistas ou estocásticos. Estes modelos permitem quantificar as características dum fenómeno espacial estruturado, inferindo as grandezas dos fenómenos no espaço não amostrado a partir da informação disponível.

Sabendo que a caracterização espacial e espaço-temporal de um determinado fenómeno depende da concepção de um modelo que melhor defina e caracterize o conjunto de dados experimentais disponíveis, a concepção dum modelo, é a base da modelação do fenómeno. Por

esta razão, esta primeira etapa na modelização pode ser considerada como sendo uma das mais importantes de todo o estudo geoestatístico. Segundo António Brotas, “...um «bom modelo» é um modelo que começa por «não ser mau» e que dá bons resultados” (SOARES, 2000).

### 3.2.1. ESTUDO DAS VARIÁVEIS – VARIOGRAFIA

Os modelos geoestatísticos consideram que a correlação entre duas variáveis aleatórias depende apenas de distância espacial entre elas e é independente da sua localização.

Num espaço  $A$ , uma determinada variável  $Z(x)$ , distribuída em diversos pontos  $x$ , assume um valor que está relacionado com os valores obtidos a partir de pontos situados a uma certa distância  $h$ , e esta influência será tanto maior quanto menor for a distância entre os pontos.

A correlação entre duas variáveis aleatórias pode ser medida através da covariância  $C(h)$  ou do variograma  $\gamma(h)$ . No entanto, para que esta correlação possa ser efectuada há que considerar que todas as variáveis aleatórias têm a mesma média, ou estacionariedade de 1ª ordem (GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000),

$$E\{Z(x_1)\} = E\{Z(x_2)\} = \dots = E\{Z(x_n)\} = E\{Z(x)\} = m, \quad \text{Equação 3.1}$$

passando  $m$  a ser independente da localização da variável aleatória, e estimado à custa de uma média aritmética dos valores das realizações das variáveis aleatórias:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N Z(x)_\alpha. \quad \text{Equação 3.2}$$

A covariância  $C(h)$  mede o grau de relação ou dependência linear entre duas variáveis aleatórias numa mesma direcção e é dada pela seguinte expressão:

$$C(h) = \frac{1}{N(h)} \sum_{\alpha=1}^{N(h)} [Z(x)_\alpha Z(x_\alpha + h)] - m(x_\alpha) m(x_\alpha + h). \quad \text{Equação 3.3}$$

A função variograma  $\gamma(h)$  permite descrever quantitativamente a variação no espaço de um determinado fenómeno, e a sua expressão é a seguinte:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{\alpha=1}^{N(h)} [Z(x_{\alpha}) - Z(x_{\alpha} + h)]^2 \quad \text{Equação 3.4}$$

onde:

$\gamma(h)$  - Função variograma;

$h$  - Distância entre as amostras;

$N(h)$  - Número de pares de pontos amostrais distanciados de  $h$  e segundo a direcção do vector  $\vec{h}$ ;

$Z(x)$  - Valor da variável medida na posição  $x$ ;

$Z(x + h)$  - Valor da variável medida na posição  $x + h$ .

e define-se como sendo a esperança matemática do quadrado da diferença entre os valores de pontos no espaço, separados por uma distância  $h$ .

A correlação entre duas amostras é dada pela função variograma e a covariância espacial conforme representada na Figura 3.1.

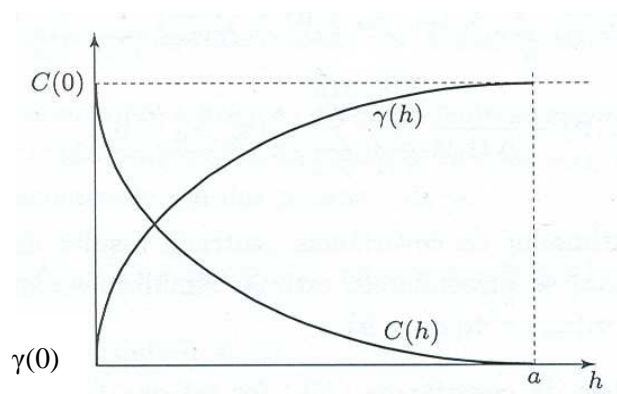


Figura 3.1 – Função variograma e covariância (adaptado de: SOARES, 2000).

Pela análise da Figura 3.1 nota-se que para distâncias superiores à amplitude  $a$  deixa de haver correlação entre pares de pontos separados de  $h$  ( $C(h) = 0$  se  $h \geq a$ ).

No caso específico dum fenómeno de contaminação de solos o tipo de informação que se pretende tirar será o comportamento espacial da contaminação. Assim, a continuidade espacial de  $Z(x)$ , ou seja, da variável aleatória, pode ser medida, para vários valores de  $h$ , pelo estimador do variograma (também denominado por semivariograma).

Após o cálculo dos diferentes valores de variograma para diferentes valores de  $h$  com base num conjunto de amostras representativas de uma dada área  $A$ , há que modelizá-los por uma função geral e representativa que quantifique a continuidade espacial da variável aleatória  $Z(x)$ . Essa função geral e representativa não é mais do que uma curva média. Ao ajustar-se esta curva média está-se a inferir um determinado andamento do variograma  $\gamma(h)$  representativo da área em estudo e para toda a gama de valores de  $h$ . Deste modo, modeliza-se e sintetiza-se os principais padrões de continuidade espacial representativos do fenómeno em estudo (SOARES, 2000).

### 3.2.1.1. MODELOS TEÓRICOS DE VARIOGRAMAS

O ajuste de um modelo teórico é uma etapa muito importante no estudo geoestatístico pois, num modelo único e coerente, faz-se a síntese das características do fenómeno. Estes modelos são conjuntos restritos de funções positivas sendo habitualmente utilizados quatro modelos-tipo na modelação de variogramas experimentais, o modelo esférico, o modelo exponencial, o modelo gaussiano e o modelo potência.

Na área das Ciências da Terra utilizam-se, habitualmente, o modelo esférico e o modelo exponencial. Neste caso de estudo utilizou-se apenas o modelo esférico, pois foi aquele que melhor descreveu os dados experimentais. Por esta razão, apenas este é desenvolvido seguidamente.

#### 3.2.1.1.1 MODELO ESFÉRICO

O modelo esférico é função de dois parâmetros: patamar  $C$ , que corresponde ao limite superior para o qual tendem os valores do variograma à medida que os valores de  $h$  aumentam, e a amplitude  $a$ , que corresponde à distância a partir da qual os valores de  $\gamma(h)$  estabilizam e são iguais a um patamar que é normalmente coincidente com a variância da variável aleatória  $Z(x)$ . A amplitude mede a distância a partir da qual os valores da variável aleatória  $Z(x)$  deixam de estar correlacionados, ou seja, tornam-se independentes.

A expressão desta função é a seguinte (GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000):

$$\gamma(h) = \begin{cases} C \left[ 1.5 \frac{h}{a} - 0.5 \left( \frac{h}{a} \right)^3 \right], & h \leq a \\ C & h > a \end{cases} \quad \text{Equação 3.5}$$

Um fenómeno que se deve tomar atenção é o chamado efeito de pepita, que representa a aleatoriedade da variável em estudo para pequenas distâncias de  $h$ . Teoricamente, o variograma assume o valor zero quando  $h = 0$ . Na realidade isso pode não acontecer. O que se verifica é que há um valor mínimo de  $h$  para o qual pode ser quantificado o valor de  $\gamma(h)$ . Quando esse valor mínimo é elevado, significando a grande variabilidade das amostras a pequena escala, o valor do  $\gamma(h)$  pode não tender para zero quando  $h$  tende para zero. Assim o variograma é modelizado por uma ordenada na origem igual a uma constante  $C_0$ , designada efeito de pepita.

Após o estudo das variáveis e o ajustamento modelo por um teórico passa-se a etapa de caracterização espacial de uma determinada variável. Esta caracterização pode ser efectuada por métodos geoestatísticos que se baseiam em modelos de inferência espacial – estimação – ou por métodos geoestatísticos que se baseiam em modelos de simulação.

### 3.2.2. ESTIMAÇÃO GEOESTATÍSTICA

O objectivo geral da estimação geoestatística é obter a imagem mais provável das características de um determinado fenómeno que, simultaneamente, contenha os valores experimentais, retirados das amostras. A estimação deve (GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000):

- Reflectir a maior ou menor “proximidade” estrutural das amostras em relação ao ponto a estimar – variância de estimação mínima;
- Possuir um efeito desagregador de eventuais agrupamentos preferenciais (*clusters*) de amostras – não enviesamento.

O primeiro critério implica que a média dos estimadores numa determinada área  $A$  seja igual à média dos valores reais. O segundo critério diz que a média do quadrado dos desvios deve ser mínima, o que significa que quanto mais dispersa for a nuvem dos valores estimados vs valores reais, maior será a imprecisão do estimador.

Ao processo de estimação geoestatística está sempre associada um tipo de incerteza – incerteza local – que se define como sendo a probabilidade de um determinado valor localizado na posição  $x_0$  tomar um valor diferente (ser maior ou menor que um determinado valor de corte, por exemplo).

A estimação geoestatística é feita por intermédio de um algoritmo de interpolação linear – a krigagem, e usa informação a partir do variograma para encontrar os pesos óptimos a serem associados às amostras com valores conhecidos, que irão estimar localizações desconhecidas. É entendida como uma análise de regressão que procura minimizar a variância estimada a partir de um modelo prévio, que leva em conta a dependência estocástica entre os dados distribuídos no espaço (GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000).

### 3.2.2.1. KRIGAGEM NORMAL

A Krigagem Normal utiliza-se para a estimação dos valores médios de uma variável no espaço ou no tempo. Permite a estimação espacial das concentrações médias de um determinado poluente no solo, de forma a dar uma indicação preliminar da dispersão espacial da variável em estudo. Este estimador permite a inferência espacial de uma grandeza não amostrada, localizada num ponto  $x_0$ , e não é mais do que uma combinação linear do conjunto de  $N$  variáveis vizinhas de  $x_0$  ( $Z(x_\alpha), \alpha = 1, 2, \dots, N$ ). Como referido anteriormente, qualquer estimador de inferência espacial deve cumprir os dois critérios em relação ao erro de estimação: não enviesamento (1º) e variância de estimação mínima (2º). A Equação 3.6 reflecte o processo de interpolação espacial geoestatístico (SOARES, 2000):

$$[Z(x_0)]^* = \sum_{\alpha=1}^N \lambda_\alpha Z(x_\alpha) \quad \text{Equação 3.6}$$

Contudo, este estimador tende a subestimar as classes extremas de concentrações mais elevadas, e a subestimar as mais baixas.

### 3.2.2.2. FORMALISMO E KRIGAGEM DA INDICATRIZ

Este formalismo tem por base a utilização de uma variável binária com sentido de probabilidade definida para amostras classificadas de acordo com valores de referência a adoptar. No caso específico de uma avaliação de contaminação, as amostras são classificadas, de acordo com o valor de referência estabelecido por norma, como amostras contaminadas ou não contaminadas (SOARES, 2000).

De acordo com SOARES, (2000), considere-se a variável  $Z(x)$  distribuída espacialmente numa área  $A$ . Se esta variável for transformada numa variável indicatriz  $I_z(x)$  com base no teor de corte  $z$ , tem-se:

$$I_z(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } Z(x) < z \\ 0 & \text{se } Z(x) \geq z \end{cases} \quad \text{Equação 3.7}$$

Assim, em qualquer ponto  $x_0$  no espaço  $A$ , esta variável indicatriz pode ser interpretada como a probabilidade de o valor de  $Z(x_0)$  ser inferior a  $z$ :

$$I_z(x_0) = \text{prob}\{Z(x_0) < z\} \quad \text{Equação 3.8}$$

Deste modo, à semelhança da krigagem normal, para a variável  $Z(x)$ , o valor de  $I_z(x_0)$  pode ser estimado através da combinação linear dos valores  $I_z(x_\alpha)$  das amostras vizinhas, de acordo com a seguinte expressão:

$$[I_z(x_0)]^* = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}(z) I_z(x_{\alpha}) \quad \text{Equação 3.9}$$

De acordo com os critérios fundamentais da krigagem, também este estimador deve cumprir:

- Não enviesamento;
- Variância de estimação mínima.

### 3.2.3. SIMULAÇÃO GEOESTATÍSTICA

O objectivo geral da simulação geoestatística é fornecer um conjunto de imagens equiprováveis das características de um determinado fenómeno com a mesma variabilidade espacial dos valores experimentais. Esta será, para já, a grande vantagem da simulação geoestatística em relação à estimação geoestatística, visto que a estimação apenas fornece a imagem mais provável das características de um determinado fenómeno. Com a simulação geoestatística consegue-se determinar a probabilidade de um determinado conjunto de valores localizados nas respectivas posições tomarem valores diferentes (serem maiores ou menores que um determinado valor de corte, por exemplo). Ao processo de simulação geoestatística associa-se a incerteza espacial, resultante do comportamento simultâneo de diferentes valores.

Na simulação geoestatística cada imagem simulada apresenta a média, o histograma, a variabilidade espacial (o mesmo variograma) e a influência espacial dos valores experimentais. Nas imagens geradas pela simulação geoestatística reproduz-se a proporção e a maior ou menor



continuidade espacial do fenómeno em estudo, das heterogeneidades e das classes extremas dos histogramas destas características (SOARES, 2000).

A simulação geoestatística deve cumprir aspectos, que garantem a fiabilidade das imagens geradas. Esses aspectos, baseados no contexto de que a simulação geoestatística pretende reproduzir a variabilidade do fenómeno, têm que garantir que, tanto a função de distribuição das diferentes classes de valores simulados como a continuidade dos mesmos são cumpridas. Estes aspectos são garantidos do seguinte modo (JOURNAL, 1989 in SOARES, 2000): se admitirmos que  $Z_s(x)$  representa o conjunto de valores simulados e que  $Z(x_\alpha)$  representa os  $n$  valores experimentais, então:

- Para qualquer valor  $z$ :  $prob\{Z(x_\alpha) < z\} = prob\{Z_s(x) < z\}$ .
- $\gamma(h) = \gamma_s(h)$ , sendo  $\gamma(h)$  e  $\gamma_s(h)$  os variogramas dos valores experimentais e dos valores simulados, respectivamente.
- Condicionamento aos valores experimentais:  $Z(x_\alpha) = Z_c(x_\alpha)$ , isto é, em qualquer ponto experimental  $x_\alpha$ , o valor experimental e o valor simulado coincidem. Assim, além de possuírem a mesma variabilidade, a imagem simulada passa pelos valores experimentais, significando que possuem coincidência espacial e que os valores dos mapas simulados são influenciados pelas amostras.

### 3.2.3.1. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL

Para se gerar um conjunto de variáveis aleatórias aplica-se o princípio da simulação sequencial (SOARES, 2000) que é um método bastante simples. Baseia-se na relação de Bayes em passos sequenciais sucessivos. A relação de Bayes é a seguinte:

$$F(Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N) = F(Z_1)F(Z_2|Z_1)F(Z_3|Z_1, Z_2) \dots F(Z_N|Z_1, Z_2, \dots, Z_{N-1}) \quad \text{Equação 3.10}$$

A geração do conjunto de valores  $Z_1, Z_2, \dots, Z_N$  efectua-se do seguinte modo:

- Simulação do primeiro valor  $Z_1$  a partir da distribuição  $F(Z_1)$ ;
- Simulação do segundo valor  $Z_2$  a partir da distribuição condicional descrita pela relação de Bayes;
- Assim todo o conjunto de valores será gerado de acordo com a distribuição condicional descrita pela relação de Bayes.

Considere-se então, uma função conjunta de  $N$  variáveis aleatórias e  $n$  dados experimentais condicionantes iniciais  $F(N) = (Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N | (n))$ . O processo resume-se em três passos (SOARES, 2000):

1. Simulação do valor  $z_1$  a partir da função de distribuição cumulativa  $F(Z_1 | (n))$ . De seguida este valor  $z_1$  é dado como condicionante para os subsequentes passos de simulação, passando os dados condicionantes a

$$\{n+1\} = \{n\} \cup \{z_1\}.$$

2. Simulação de um valor  $z_2$  da distribuição condicional  $F(Z_2 | \{n+1\})$  com base nos  $\{n+1\}$  valores condicionantes. Estes passam a ser actualizados para

$$\{n+2\} = \{n+1\} \cup \{z_2\}.$$

3. Repete-se este processo sequencial para a simulação das  $N$  variáveis.

As  $N$  variáveis aleatórias dependentes  $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N$ , podem corresponder à mesma característica, espacialmente referenciada nos  $N$  nós do campo espacial em estudo. Considerando-se os  $n$  valores condicionantes iniciais como correspondentes aos valores experimentais, então  $F(N) = (Z(x_1), Z(x_2), Z(x_3), \dots, Z(x_N) | (n))$ .

O conhecimento das funções de distribuição cumulativa condicionais, apresentadas de seguida, reside na utilização da estimação geoestatística.

$$\begin{aligned} & \text{prob}\{Z(x_1) \leq z | (n)\} \\ & \text{prob}\{Z(x_2) \leq z | (n+1)\} \\ & \text{prob}\{Z(x_3) \leq z | (n+2)\} \\ & \vdots \\ & \text{prob}\{Z(x_N) \leq z | (n+N-1)\} \end{aligned}$$

Segundo JOURNAL (1989) (in SOARES, 2000) essas distribuições condicionais podem ser estimadas com a krigagem da indicatriz e a krigagem multigaussiana dando origem ao algoritmo simulação sequencial da indicatriz (SSI) e simulação sequencial gaussiana (SSG), respectivamente.

### 3.2.3.2. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL GAUSSIANA

#### 3.2.3.2.1 FORMALISMO MULTIGAUSSIANO

Neste tipo de abordagem admite-se um único modelo conhecido para a lei de distribuição do conjunto de variáveis aleatórias.

Admite-se que o conjunto de variáveis aleatórias  $\{Z(x), x \in A\}$  segue uma lei conjunta multigaussiana, onde qualquer par de valores  $Z(x_1)$  e  $Z(x_2)$  possui também uma lei de distribuição bigaussiana, caracterizada pela covariância  $C_Z(x_1, x_2)$ . Qualquer função de distribuição de probabilidades condicional é também Gaussiana e determinada pela média e variância condicionais. A lei de distribuição de probabilidades, em qualquer ponto  $x_0$ , é determinada pela esperança e variância condicionais:

$$\begin{aligned} E\{Z(x_0)|Z(x_1), \dots, Y(x_N)\} & \quad \text{Esperança} \\ \text{var}\{Z(x_0)|Z(x_1), \dots, Y(x_N)\} & \quad \text{Variância condicional} \end{aligned}$$

Deste modo, a função de distribuição de probabilidades Gaussiana de  $x_0$  é:

$$G(x_0; z) = G \left[ \frac{z - E\{Z(x_0)|Z(x_\alpha), \alpha = 1, \dots, N\}}{\sqrt{\text{var}\{Z(x_0)|Z(x_\alpha), \alpha = 1, \dots, N\}}} \right] \quad \text{Equação 3.11}$$

A adopção da hipótese de multigaussianidade conduz a que seja apenas necessário conhecer os dois primeiros momentos condicionais, a média e a variância, para se caracterizar a função de distribuição de probabilidades. Visto a estacionaridade da média se verificar, pela hipótese de multiGaussianidade, podem-se utilizar os estimadores de krigagem simples e a respectiva variância da krigagem.

$$E\{Z(x_0)|Z(x_i), i = 1, \dots, N\} = [Z(x_0)]^* = m(x_0) + \sum_{\alpha=1}^N \lambda_\alpha [Z(x_\alpha) - m(x_\alpha)] = \sum_{\alpha=1}^N \lambda_\alpha Z(x_\alpha) \quad \text{Equação 3.12}$$

Como as médias são conhecidas e constantes:

$$m(x_0) = m(x_\alpha) = 0 \quad \text{Equação 3.13}$$

assim,

$$\text{var}\{Z(x_0)|Z(x_i), i = 1, \dots, N\} = \sigma_E^2(x_0) = \sum_{\alpha} \lambda_\alpha C_Z(x_\alpha, x_0) \quad \text{Equação 3.14}$$

Então, a função de distribuição de probabilidades no ponto  $x$  fica definida do seguinte modo:

$$G(x_0; z) = G\left[\frac{z - [Z(x_0)]^*}{\sigma_Z^*(x_0)}\right] \quad \text{Equação 3.15}$$

A simulação sequencial Gaussianacomoo o próprio nome indica, desenvolve-se num ambiente Gaussiano. Assim sendo, o primeiro passo será transformar os valores originais em valores Gaussianos,

$$Y(x) = \varphi[Z(x)] \quad \text{Equação 3.16}$$

Esta transformação é efectuada de acordo com o explicado no Formalismo Multigaussiano.

Assim, a SSG resume-se à aplicação da metodologia explicada na simulação sequencial (3.2.3.1), mas em ambiente Gaussiano. Tomando como exemplo, imaginando um campo  $A$  com 6 amostras  $Z(x_i), i = 1, 2, \dots, 6$ , transformadas em valores Gaussianos,  $Y(x_i), i = 1, 2, \dots, 6$  (SOARES, 2000):

1. Estimação da média e variância condicional de uma localização  $x_7$ , em  $A$  que se pretende simular:

$$E\{Y(x_7)|\{n\}\} = \sum_{\alpha=1}^N \lambda_{\alpha} Y(x_{\alpha}) \quad \text{Krigagem simples de } Y(x)$$

$$\sigma_{sk}^2(x_7) = \text{var}\{Y(x_7)|\{n\}\}. \quad \text{Variância de krigagem simples}$$

Segue-se a geração de um valor  $p$  a partir de uma lei de distribuição uniforme entre 0 e 1. O valor Gaussiano  $Y_s(x_7)$  é obtido a partir da função inversa da distribuição cumulativa Gaussiana local:

$$Y_s(x_7) = G^{-1}([Y(x_7)]^*; \text{var}[Y(x_7)]^*; p). \quad \text{Equação 3.17}$$

Este novo valor passa a integrar os valores condicionantes:  $\{n+1\} = \{n\} + \{Y(x_7)\}$ .

2. O mesmo processo de 1 é repetido para um outra localização  $x_8$ , localizado aleatoriamente em  $A$ , estimando-se a média e variância condicional com base nos  $\{n+1\}$  valores condicionantes. Este valor simulado  $Y_s(x_8)$  passa a integrar o conjunto condicionante  $\{n+2\} = \{n+1\} \cup \{Y_s(x_8)\}$ . Este procedimento é repetido sucessivamente até ser simulado o último valor  $Y_s(x_N)$  de  $A$  com base nos  $\{n+N\}$  valores condicionantes.

3. A simulação de todos os valores resulta num mapa simulado Gaussiano  $Y_s(x)$  que é no final transformado nos valores  $Z_s(x)$  pela transformada inversa:

$$Z_s(x) = \phi^{-1}[Y_s(x)] \quad \text{Equação 3.18}$$

### 3.2.3.3. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ

À semelhança da simulação sequencial gaussiana, a simulação sequencial da indicatriz desenvolve-se de acordo com os modelos de simulação sequencial, no qual as funções de distribuição condicionais são estimadas pelo formalismo da indicatriz (3.2.2.2) (JOURNEL, 1988 *in* SOARES, 2000).

## 4. FUNDAMENTOS TEÓRICOS PARA A AVALIAÇÃO DE RISCO

### 4.1. MODELO CONCEPTUAL

Para se elaborar uma avaliação adequada e correcta duma qualquer área passível de estar contaminada, alguns passos devem ser seguidos metodologicamente para que seja garantido o sucesso do estudo. Assim sendo, face a um local potencialmente contaminado, a metodologia de investigação exige que se admita um modelo conceptual de contaminação que tem por objectivo (PETTS *et al*, 1997):

1. Identificar as substâncias contaminantes;
2. Avaliar o grau de contaminação;
3. Identificar os riscos;
4. Avaliar os riscos.

Este modelo conceptual de contaminação deve assumir a existência de três entidades distintas: a Fonte, definida como sendo a origem da contaminação, o Alvo, definido como sendo o meio receptor da contaminação, e o Trajecto, definido como sendo o caminho que permite a condução da contaminação desde a fonte até ao alvo.

[Fonte (ou origem) → Trajecto → Alvo] (PETTS *et al*, 1997)

- a) A origem ou fonte de contaminação é todo o local cujas concentrações de elementos poluentes estejam acima de valores de referência;
- b) O trajecto ou meio de transferência da contaminação, que assume a dupla condição de transmissor/barreira e receptor primário;
- c) O alvo (ou receptor secundário) é, para além do meio biofísico, o meio antropogénico.

É a partir da análise integrada destas três entidades que se pode definir a existência de risco. Sucintamente poderá concluir-se:

- Se não existir uma fonte, não existe contaminação, logo não existe risco;
- Se existe uma fonte mas não existe alvo, nenhum receptor será afectado, logo não existe risco;
- Se existe fonte e alvo mas não existe trajecto, não é possível a ligação entre estes últimos, logo mais uma vez não existe risco.

Conclui-se, deste modo, que para existir risco terá que existir necessariamente uma conexão entre as três entidades referidas.

## 4.2. CARACTERIZAÇÃO DA FONTE, DO TRAJECTO E DO ALVO DE CONTAMINAÇÃO

A caracterização das fontes de contaminação deve conter e seguir as seguintes etapas:

- a) Analisar os potenciais locais de contaminação:
  - Identificar as fontes de contaminação e definir os valores - guia das substâncias poluentes.
- b) Identificar e caracterizar os elementos químicos do meio (solo e água):
  - Caracterizar os elementos químicos em termos toxicológicos, conhecidos os contaminantes e a respectiva relação dose - efeito;
  - Avaliar os efeitos na saúde pública e no ambiente, isto é, descrever e quantificar a relação entre a exposição ao contaminante e os efeitos nefastos que esta cause na saúde pública e no ambiente.

Os trajectos de contaminação são meio geológico e as águas subterrâneas, pois pode ocorrer contaminação por infiltração dos contaminantes no solo e posterior percolação subterrânea (LA GREGA, *et al*, 2001). No entanto considera-se que é um risco efectivo devido a ser limitado em extensão e cuja evolução está dependente dos mecanismos de atenuação natural. Os trajectos funcionam apenas como receptores primários e transmissores da contaminação.

A caracterização dos alvos da contaminação define-se segundo a sua sensibilidade às substâncias toxicológicas e à sua posição no meio receptor (PETTS, 1997; LA GREGA, *et al*, 2001). Teoricamente, a sensibilidade do alvo pode ser definida toxicologicamente, após conhecidos os contaminantes e as respectivas relações dose - efeito. A avaliação da exposição resulta da estimação da intensidade, frequência e duração de exposição de humanos (ou outros) às substâncias perigosas. Esta exposição pode ainda ser considerada directa ou indirecta. É considerada directa quando o contacto entre a substância tóxica e o alvo é feito por ingestão, inalação ou via cutânea de solos e/ou poeiras. É considerada indirecta quando o contacto ocorre por ingestão ou via cutânea de águas ou alimentos provenientes de captações ou solos contaminados.

## 4.3. AVALIAÇÃO DA CONTAMINAÇÃO, ANÁLISE DE RISCO E PLANO DE DESCONTAMINAÇÃO

Com o objectivo de avaliar correctamente o grau de contaminação de uma determinada área e garantir o aproveitamento de todos os recursos técnicos e económicos disponíveis é necessário

definir uma metodologia que permita conhecer a área no que diz respeito à existência de certas substâncias contaminantes bem como os efeitos nefastos que essas possam causar tanto na saúde pública como no ambiente. Deste modo, esta metodologia deve ser faseada, sendo que a informação obtida em cada fase constituirá a base da fase posterior.

#### **4.3.1. ETAPA 1: AVALIAÇÃO DA CONTAMINAÇÃO DOS TERRENOS**

A avaliação da contaminação dos terrenos deve ser, tal como já foi referido anteriormente, efectuada de uma forma faseada. De seguida apresentam-se as três fases que a avaliação da contaminação deve contemplar (COSTA, 2001; SHARMA *et al*, 2004; BRITO, 2005).

##### **4.3.1.1. FASE DE INVESTIGAÇÃO PRELIMINAR**

Esta primeira fase engloba a recolha de dados históricos do local relativamente ao tipo actividades e processos industriais efectuados recorrendo a relatórios de estudos anteriores e a todo o tipo de informação relevante que permita caracterizar o local. Também deve ser efectuada uma caracterização do ponto de vista geológico, geotécnico, hidrogeológico e morfológico do terreno, permitindo identificar zonas de potencial contaminação (*hot spots*) e zonas de concentrações anómalas (focos de contaminação). Esta informação é obtida através de métodos expeditos de prospecção indirecta e métodos de varrimento (métodos *screening*).

Deve ser elaborado um modelo conceptual preliminar de contaminação que resulta da síntese e integração de toda a informação obtida, e representa a situação do local quanto ao potencial de contaminação, a relação com o meio envolvente e a relação com os bens a proteger.

##### **4.3.1.2. FASE DE INVESTIGAÇÃO EXPLORATÓRIA**

Nesta fase, com base nos resultados obtidos na fase anterior, procede-se à realização de campanhas de prospecção directa de solos e águas (superficiais e subterrâneas), identificando-se os elementos químicos presentes e respectivas concentrações, e caracterizando-se os terrenos de acordo com as suas propriedades físicas (permeabilidade, profundidade do NF, tipo de materiais e outros). Deste modo, caracteriza-se a geometria dos terrenos através da elaboração de perfis litológicos. Nesta fase procede-se ao refinamento do modelo conceptual preliminar.

No caso de haver confirmação de contaminação, isto é, se as concentrações de determinadas substâncias excederem os valores de referência, estabelecem-se bases para a elaboração de um plano de investigação detalhada.



#### 4.3.1.3. FASE DE INVESTIGAÇÃO DETALHADA

Esta fase tem como objectivo quantificar a contaminação, de acordo com uma avaliação detalhada das características da fonte de contaminação bem como do meio afectado. É realizada a determinação da dimensão das áreas e/ou volumes afectados, de acordo com análise geoestatística dos resultados obtidos nas análises químicas, tendo em vista a caracterização da pluma de contaminação e volume de solos contaminados para os valores de referência considerados.

Procede-se de seguida a uma análise de risco, com o objectivo de determinar e classificar se os níveis de contaminação são aceitáveis ou não para a saúde pública e para o ambiente. No caso de esses níveis serem aceitáveis, há que propor medidas de monitorização que garantam essa classificação a médio e longo prazo, caso contrário, isto é, se os níveis de contaminação forem elevados o suficiente de modo a que não se garanta a protecção da saúde pública e do ambiente, devem ser estabelecidas as bases para a elaboração de um Plano de Descontaminação, que visa detalhar as medidas de recuperação a adoptar para que o risco seja minimizado ou eliminado. Esse Plano de Descontaminação deve levar em conta as melhores metodologias disponíveis para o tratamento dos terrenos, o sucesso em termos ambientais, a minimização dos custos e do tempo de operacionalidade.

#### 4.3.2. ETAPA 2: ANÁLISE DE RISCO

A Avaliação de Risco é uma ferramenta utilizada tanto para estimar o perigo para a saúde humana e meio ambiente que um determinado resíduo perigoso pode causar em determinadas situações, como também auxilia a tomada de decisões, acções e metas de remediação, bem como avaliar áreas contaminadas (LA GREGA, *et al*, 2001; SHARMA, 2004; BRITO, 2005).

A Análise de Risco para a Saúde Humana (USEPA, 1989) é um processo organizado de forma metodológica que se utiliza para descrever e estimar a possibilidade de ocorrência de um afeito nefasto para a saúde devido à exposição ambiental de determinadas substâncias químicas.

##### 4.3.2.1. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO DE RISCO

As metodologias de avaliação de risco baseiam-se em princípios de toxicologia humana e no reconhecimento das propriedades físico-químicas dos elementos contaminantes e respectivo comportamento ambiental. A identificação e respectiva quantificação dos riscos têm elevada importância pois servirá de base para a identificação dos objectivos a serem atingidos na remediação bem como na definição de medidas de mitigação a serem adoptadas. De acordo com

a DIRECTIVA 93/67/CEE a avaliação de risco compreende a identificação de perigo e, consoante os casos:

- A avaliação dose - resposta: consiste na determinação da relação entre a concentração ou o nível de exposição a uma substância e a incidência e gravidade de um efeito.
- A avaliação da exposição: consiste na determinação das emissões, percursos e mobilidade de uma substância e a sua consequente decomposição ou degradação, de modo a estimar as concentrações/doses que as populações humanas ou os compartimentos ambientais (aquático, terrestre e atmosférico) estão ou poderão vir a estar expostos.
- A caracterização do risco: consiste na estimação da incidência e da gravidade dos efeitos nefastos que podem ocorrer na população ou num ou mais compartimentos ambientais, devido à exposição efectiva ou previsível a uma substância química.

As metodologias existentes de avaliação de risco para a saúde humana em áreas contaminadas seguem, de um modo geral, uma metodologia desenvolvida pela Agência de Protecção Ambiental Americana, descrita do seguinte modo:

- Avaliação e compilação dos dados;
- Avaliação da exposição aos elementos químicos;
- Avaliação da toxicidade dos elementos químicos;
- Caracterização e quantificação dos riscos;
- Monitorização dos riscos.

Os procedimentos adoptados numa avaliação de risco dependem directamente do facto das substâncias poluentes apresentarem ou não perigos cancerígenos. A Agência de Protecção Ambiental Americana (USEPA, 1989) possui uma classificação elaborada com base em provas detectadas em humanos e animais. Essa classificação está descrita na Tabela 4.1.

Evidências em Humanos	Evidências em Animais				
	Suficiente	Limitada	Inadequada	Sem dados	Sem evidências
Suficiente	A	A	A	A	A
Limitada	B1	B1	B1	B1	B1
Inadequada	B2	C	D	D	D
Sem dados	B2	C	D	D	E
Sem evidências	B2	C	D	D	E

**Tabela 4.1**– Classificação das substâncias poluentes (fonte: *USEPA*).

- **Grupo A:** substâncias com efeitos cancerígenos nos humanos;
- **Grupo B1:** substâncias com efeitos cancerígenos prováveis nos humanos, baseado em evidências limitadas de efeitos cancerígenos através de estudos em humanos;
- **Grupo B2:** substâncias com efeitos cancerígenos prováveis nos humanos, baseado em evidências suficientes de efeitos cancerígenos através de estudos em animais;
- **Grupo C:** substâncias com efeitos cancerígenos possíveis nos humanos;
- **Grupo D:** substâncias não classificadas devido a dados insuficientes;
- **Grupo E:** substâncias classificadas através de provas como não cancerígenas.

#### 4.3.2.1.1 IDENTIFICAÇÃO DO PERIGO

A identificação do perigo consiste na avaliação qualitativa de uma determinada substância que determina se a exposição a essa substância apresenta danos. Um método que pode ser efectuado para se saber se a substância é nociva será efectuar estudos epidemiológicos, nos quais se verifica se a frequência da doença é superior num grupo exposto à substância, comparativamente a um outro grupo que não foi exposto a essa mesma substância. Ao abrigo da Lei de Controlo de Substâncias Tóxicas, qualquer nova substância é considerada tóxica até que se prove o contrário.

Por vezes, a avaliação qualitativa do risco é considerada como uma combinação da avaliação da exposição, da avaliação dose – resposta e da caracterização do risco.

A USEPA possui uma base de dados designada por “*Integrated Risk Information System - IRIS*” (IRIS, USEPA, 1989) que contém informação sobre a toxicidade de muitas substâncias.

#### 4.3.2.1.2 AVALIAÇÃO DA EXPOSIÇÃO

A avaliação da exposição consiste num processo em que se identificam os organismos expostos a um contaminante e se determinam as doses recebidas, isto é, determina-se a intensidade, frequência, duração e caminhos de exposição, actual ou futura, a um determinado contaminante.

A avaliação da exposição é efectuada com base nos possíveis cenários de ocupação para o local, considerando o uso actual e futuro, bem como a área envolvente. Nos vários cenários de exposição são identificadas as várias vias de exposição possíveis, isto é, as várias maneiras de um contaminante percorrer o caminho desde a origem ou fonte de contaminação até às populações potencialmente atingidas.

Usualmente consideram-se os seguintes cenários e ocupação do solo (LA GRECA, 2001; SHARMA *et al*, 2004; WATERLOO HYDROGEOLOGIC, 2001):

- Uso residencial – cenários para criança e adulto;
- Uso comercial/industrial – cenários para trabalhador comercial e construtor.

As vias de exposição mais usuais, a partir de solos contaminados, são:

- Ingestão de solo;
- Contacto dérmico;
- Ingestão de vegetais;
- Inalação ao ar livre;

O primeiro passo para o cálculo da avaliação da exposição é estimar a taxa de consumo de cada elemento químico consoante a via de exposição. Essa taxa de consumo para cada elemento químico é expressa como sendo a massa de uma substância em contacto com a interface do organismo exposto por unidade de peso corporal por unidade de tempo.

Existem dois tipos distintos de taxas de consumo:

→ CADD: chronic average daily dose;

→ LADD: lifetime average daily dose;

O CADD é utilizado quando se pretende determinar o índice de perigosidade de um dado elemento químico e o LADD utiliza-se quando o que se pretende calcular é o índice de risco cancerígeno. O cálculo destes índices depende da via de exposição que se considere.

#### 4.3.2.1.2.1 Via de exposição: Ingestão de solo

O cálculo do índice de perigosidade ou risco não cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.1:

$$CADD = \frac{C \times IR \times AAF \times EF \times BIO}{BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times 10^{-6} \quad \text{Equação 4.1}$$

O cálculo do índice de risco cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.2:

$$LADD = \frac{C \times IR \times AAF \times EF \times ED \times BIO}{LT \times BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times 10^{-6} \quad \text{Equação 4.2}$$

onde,

CADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição (mg/kg do corpo/dia);

LADD – Taxa de consumo diário médio para a via de exposição ao longo da vida (mg/kg do corpo/dia);

C – Concentração do contaminante no meio (mg/kg de solo);

IR – Taxa de contacto com a via de exposição (kg/dia);

AAF – Factor de ajustamento de absorção oral de solo (mg/mg);

EF – Frequência de exposição (dias/ano);

BIO – Biodisponibilidade do elemento químico no solo (mg/mg);

EF – Frequência de exposição (dias/ano);

ED – Duração da exposição (anos);

BIO – Biodisponibilidade do elemento químico no solo (mg/mg);

LT – Tempo de vida: 70 anos (por definição);

BW – Peso corporal (kg).

#### 4.3.2.1.2.2 Via de exposição: Contacto Dérmico

O cálculo do índice de perigosidade ou risco não cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.3:

$$CADD = \frac{C \times SA \times AAF \times AF \times EF \times BIO}{BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times 10^{-6} \quad \text{Equação 4.3}$$

O cálculo do índice de risco cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.4:

$$LADD = \frac{C \times SA \times AAF \times AF \times EF \times ED \times BIO}{LT \times BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times 10^{-6} \quad \text{Equação 4.4}$$

onde,

CADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição (mg/kg do corpo/dia);

LADD – Taxa de consumo diário médio para a via de exposição ao longo da vida (mg/kg do corpo/dia);

C – Concentração do contaminante no meio (mg/kg de solo);

SA – Área da superfície da pele exposta ao solo (cm<sup>2</sup>);

AAF – Factor de ajustamento de absorção dérmica de solo (mg/mg);

AF – Factor de aderência do solo à pele (mg/cm<sup>2</sup>/caso)

EF – Frequência de exposição (dias/ano);

ED – Duração de exposição (anos);

BIO – Biodisponibilidade do elemento químico no solo (mg/mg);

LT – Tempo de vida: 70 anos (por definição);

BW – Peso corporal (kg).

#### 4.3.2.1.2.3 Via de exposição: Ingestão de Vegetais

O cálculo do índice de perigosidade ou risco não cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.5:

$$CADD = \frac{(B_{vr} \times IR_{vr} + B_{va} \times IR_{va}) \times FI \times EF}{BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times C \times 10^{-3} \frac{Kg}{g} \quad \text{Equação 4.5}$$

O cálculo do índice de risco cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.6:

$$LADD = \frac{(B_{vr} \times IR_{vr} + B_{va} \times IR_{va}) \times FI \times EF \times ED}{LT \times BW \times 365 \frac{d}{yr}} \times C \times 10^{-3} \frac{Kg}{g} \quad \text{Equação 4.6}$$

onde,

CADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição (mg/kg do corpo/dia);

LADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição ao longo da vida (mg/kg do corpo/dia);

$B_{vr}$  – Factor de absorção do contaminante presente no solo através da raiz (mg/kg captado por mg/kg no solo)

$IR_{vr}$  – Taxa de ingestão (g/dia)

$B_{va}$  – Factor de absorção do contaminante presente no solo através das folhas (mg/kg captado por mg/kg no solo)

$IR_{va}$  – Taxa de ingestão (g/dia)

FI – Fracção de vegetais ingeridos em solos contaminados

EF – Frequência de exposição (dias/ano);

ED – Duração de exposição (anos);

C – Concentração do contaminante no meio (mg/kg de solo);

LT – Tempo de vida: 70 anos (por definição);

BW – Peso corporal (kg).

**4.3.2.1.2.4 Via de exposição: Inalação ao ar livre**

O cálculo do índice de perigosidade ou risco não cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.7:

$$CADD = \frac{C \times InhR \times ET \times AAF \times LRF \times EF}{BW \times 365 \frac{d}{yr}} \quad \text{Equação 4.7}$$

O cálculo do índice de risco cancerígeno faz-se segundo a Equação 4.8:

$$CADD = \frac{C \times InhR \times ET \times AAF \times LRF \times EF \times ED}{LT \times BW \times 365 \frac{d}{yr}} \quad \text{Equação 4.8}$$

onde,

CADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição (mg/kg do corpo/dia);

LADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição ao longo da vida (mg/kg do corpo/dia);

C – Concentração do contaminante no meio (mg/kg de solo);

InhR – Taxa de inalação do contaminante ao ar livre (m<sup>3</sup>/h)

ET – Exposição ao ar livre (h/dia)

AAF – Factor de ajustamento de absorção por inalação de elemento químico (mg/mg);

LRF – Factor de retenção do contaminante nos pulmões (mg/mg)

EF – Frequência de exposição (dias/ano);

ED – Duração de exposição (anos);

LT – Tempo de vida: 70 anos (por definição);

BW – Peso corporal (kg).

**4.3.2.1.3 CARACTERIZAÇÃO DO RISCO**

A caracterização da quantificação do risco deve ser efectuada separadamente para efeitos cancerígenos e não cancerígenos (perigosidade).

**4.3.2.1.3.1 Risco não cancerígeno (perigosidade)**

Os efeitos não cancerígenos são avaliados por meio da comparação de um nível de exposição (taxa de consumo) por período de tempo com uma dose de referência para um período de exposição similar, como indica a Equação 4.9:

$$P = \frac{CADD}{RfD} \quad \text{Equação 4.9}$$

onde,

P – Índice de perigosidade ou risco não cancerígeno;

CADD – Taxa de consumo médio diário para a via de exposição (mg/kg do corpo/dia);

RfD – Dose de referência para a via de exposição (mg/kg/dia);

A existência de perigo acontece quando o índice de perigo ultrapassa o valor 1, isto é, quando a taxa de consumo para o cenário em estudo ultrapassa a Dose de Referência.

#### 4.3.2.1.3.2 Risco cancerígeno

Os efeitos cancerígenos são avaliados a partir do factor de declive cancerígeno (*Slope Factor*), onde a probabilidade de um indivíduo desenvolver cancro ao longo da sua vida resulta da sua exposição ao composto químico susceptível de provocar cancro. É representado através da Equação 4.10:

$$RC = LADD \times SF \quad \text{Equação 4.10}$$

onde,

RC – Risco cancerígeno;

LADD – Taxa de consumo diário médio para a via de exposição ao longo da vida (mg/kg do corpo/dia);

SF – Factor de declive cancerígeno para o composto químico.

A existência de risco cancerígeno acontece quando o valor de RC é igual ou superior a  $1 \times 10^{-6}$ , correspondendo à probabilidade de 1 indivíduo contrair cancro em um milhão de indivíduos.

#### 4.3.3. PLANO DE DESCONTAMINAÇÃO

Um plano de descontaminação tem como principais objectivos proteger a saúde pública e o ambiente, bem como reabilitar o local afectado visando possibilitar o seu uso futuro.

As medidas de remediação de solos variam consoante o tipo e grau de contaminação e ainda consoante o grau de risco que esses locais possam apresentar tanto para a saúde pública como



apara o ambiente. Assim a selecção de estratégias adequadas possíveis de serem aplicadas depende de alguns factores, nomeadamente:

- Da redução do risco local, em que é feita a medição da redução do risco por parte da acção de remediação;
- Da aptidão ambiental, em que é feito o balanço (positivo/negativo) da acção de remediação em termos ambientais, no qual o uso de recursos (energia, água, espaço e poluição de outros meios) é tido em conta;
- E por último, a redução dos custos tanto monetários como temporais, ou seja, fazer o melhor e menos dispendioso no menor tempo possível.

## 5. CASO DE ESTUDO

A componente prática do presente trabalho consiste na aplicação de duas abordagens distintas de modelação geoestatística, nomeadamente, (i) a estimação/simulação de teores de zinco e transformação dos teores estimados/simulados em valores de risco e perigosidade, e (ii) a estimação/simulação de valores de risco cancerígeno e de perigosidade.

### 5.1. TRATAMENTO PRELIMINAR E ANÁLISE UNIVARIADA DOS DADOS

Para a identificação das amostras consideradas contaminadas vs não contaminadas é necessário estabelecer-se um limite de referência. Actualmente, não existe em Portugal legislação específica sobre este tema, o que remete para a utilização de legislação adoptada pelo Estado de Ontário (Canadá), recomendação do Instituto dos Resíduos português. Foram utilizados os valores de referência constantes nas normas canadianas de Ontário (OMEE, 1997), nomeadamente, na tabela A, para profundidade de amostragem inferior a 1,5m (amostras superficiais) (Tabela A do Apêndice 2: *Surface soil groundwater criteria for a potable ground water condition (A9)*) que indica como valores de referência para um solo com uso comercial/industrial, um teor máximo aceitável em cada um dos respectivos elementos químicos em estudo, os constantes no Quadro 5.1.

**Quadro 5.1– Valores de referência estabelecidos pela norma canadiana de Ontário (OMEE, 1997) (Tabela A do Apêndice 2: *Surface soil groundwater criteria for a potable ground water condition (A9)*).**

Elemento Químico	Uso do Solo (Comercial/Industrial)
Arsénio (As)	40 mg/kg
Cobre (Cu)	225 (300) mg/kg
Chumbo (Pb)	1000 mg/kg
Zinco (Zn)	600 (800) mg/kg

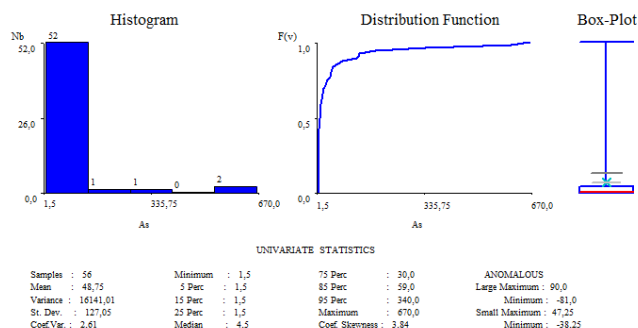
#### 5.1.1. ANÁLISE DA DISTRIBUIÇÃO E ESTATÍSTICOS BÁSICOS DAS VARIÁVEIS

Com objectivo de se identificar o tipo de distribuição e respectivos estatísticos básicos as ferramentas utilizadas foram o histograma, a função de distribuição cumulativa e o box-plot ou caixa de bigodes.

### 5.1.1.1. DISTRIBUIÇÃO DA VARIÁVEL ARSÊNIO NOS DIFERENTES NÍVEIS

#### 5.1.1.2. NÍVEL A

Gráfico 5.1 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Arsênio (nível A).

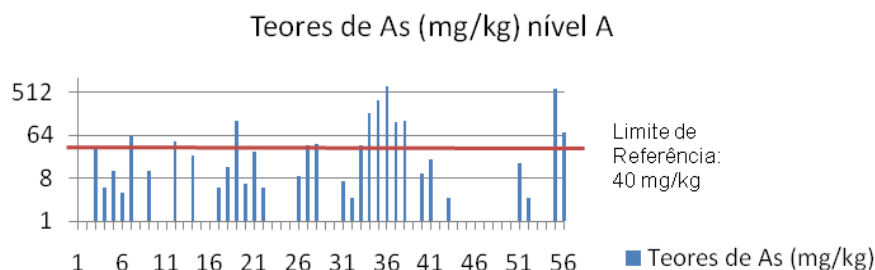


O Gráfico 5.1 apresenta para o As uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável As apresenta um valor médio de 48,75 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 670 mg/kg) e uma mediana de 4,5 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 4,5mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 75% dos dados têm valores menores ou iguais a 30 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do As (40mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.2 ilustra a posição das amostras de As relativamente ao respectivo limite de referência.

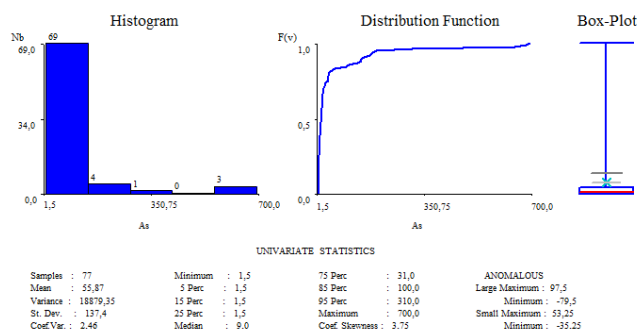
Gráfico 5.2 – Teores de Arsênio das 56 amostras recolhidas no nível A.



Pela análise do Gráfico 5.2 pode-se afirmar que 11 das 56 amostras (cerca de 20%) possuem teores de arsênio superiores ao limite de referência de 40 mg/kg.

## 5.1.1.3. NÍVEL B

Gráfico 5.3 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Arsénio (nível B).

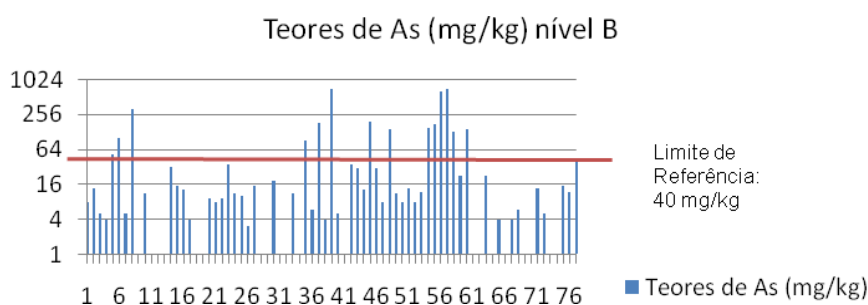


O Gráfico 5.3 apresenta para o As uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável As apresenta um valor médio de 55,87 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 700 mg/kg) e uma mediana de 9 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 9 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 75% dos dados têm valores menores ou iguais a 31 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do As (40mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.4 ilustra a posição das amostras de As relativamente ao respectivo limite de referência.

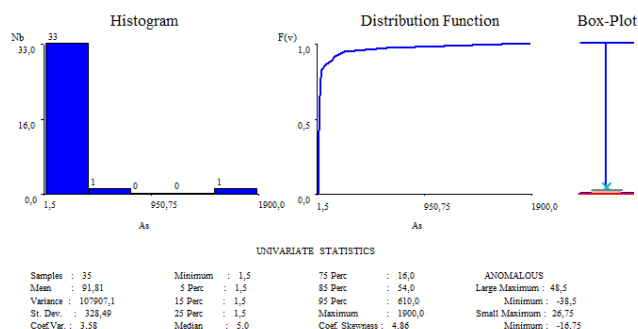
Gráfico 5.4 – Teores de Arsénio das 76 amostras recolhidas no nível B.



Pela análise do Gráfico 5.4 pode-se afirmar que 14 das 76 amostras (cerca de 18%) ultrapassam o limite de referência do Arsénio.

## 5.1.1.4. NÍVEL C

Gráfico 5.5 – Histograma e Estatísticos Básicos da variável Arsénio (nível C).

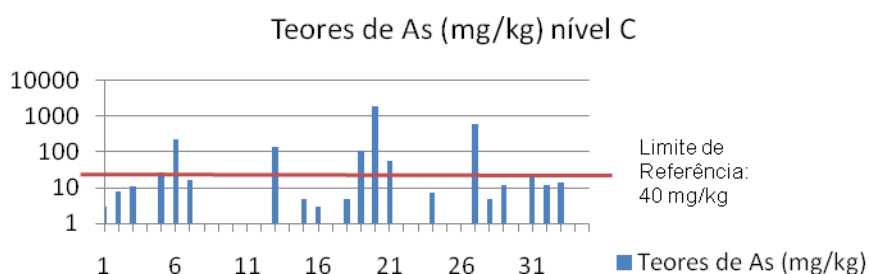


O Gráfico 5.5 apresenta para o As uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 3, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável As apresenta um valor médio de 91,81 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 1900 mg/kg) e uma mediana de 5 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 5 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 75% dos dados têm valores menores ou iguais a 16 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do As (40mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.6 ilustra a posição das amostras de As relativamente ao respectivo limite de referência.

Gráfico 5.6 – Teores de Arsénio das 35 amostras recolhidas no nível C.

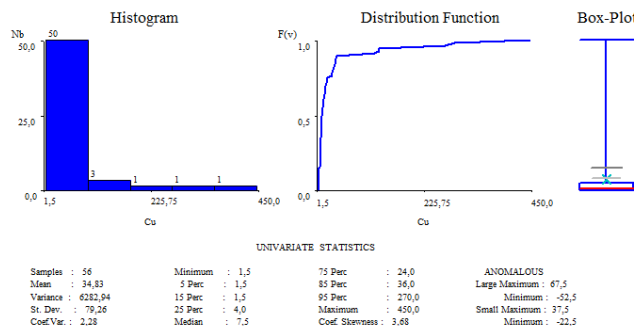


Pela análise do Gráfico 5.6 repara-se que apenas 6 das 35 amostras (cerca de 20%) ultrapassam o limite de referência estipulado para o arsénio.

## 5.1.2. DISTRIBUIÇÃO DA VARIÁVEL COBRE NOS NÍVEIS DIFERENTES NÍVEIS

### 5.1.2.1. NÍVEL A

**Gráfico 5.7 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Cobre (nível A).**

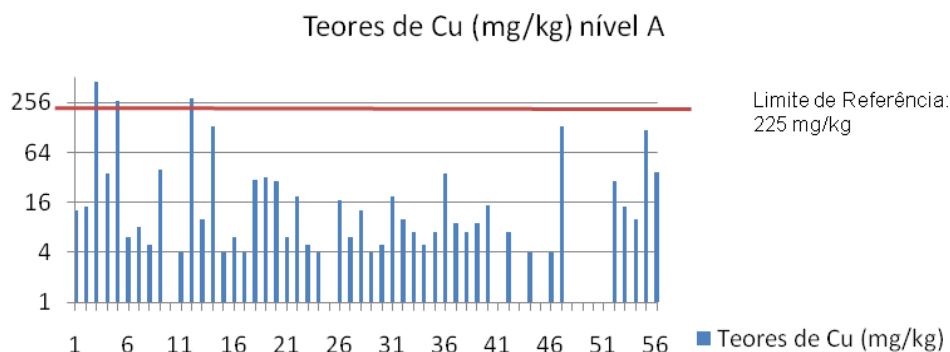


O Gráfico 5.7 apresenta para o Cu uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Cu apresenta um valor médio de 34,83 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 450 mg/kg) e uma mediana de 7,5 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 7,5 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 85% dos dados têm valores menores ou iguais a 24 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Cu (225mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.8 ilustra a posição das amostras de Cu relativamente ao respectivo limite de referência.

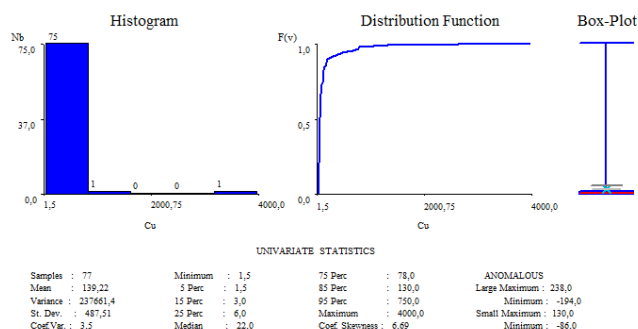
**Gráfico 5.8 – Teores de Cobre das 56 amostras recolhidas no nível A.**



Da análise do Gráfico 5.8 conclui-se que apenas 3 das 56 amostras (cerca de 5%) se encontram acima do valor de referência.

## 5.1.2.2. NÍVEL B

Gráfico 5.9 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Cobre (nível B).

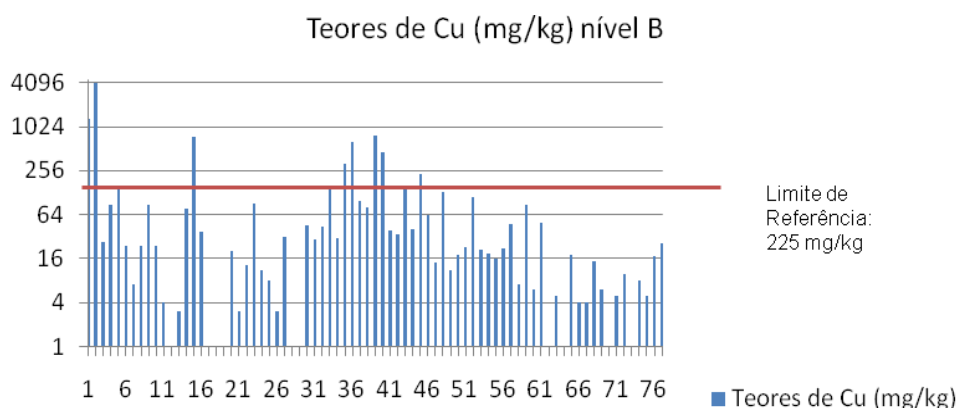


O Gráfico 5.9 apresenta para o Cu uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 3, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Cu apresenta um valor médio de 139,22 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 4000 mg/kg) e uma mediana de 22 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 22 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 85% dos dados têm valores menores ou iguais a 130 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Cu (225mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.10 ilustra a posição das amostras de Cu relativamente ao limite de referência.

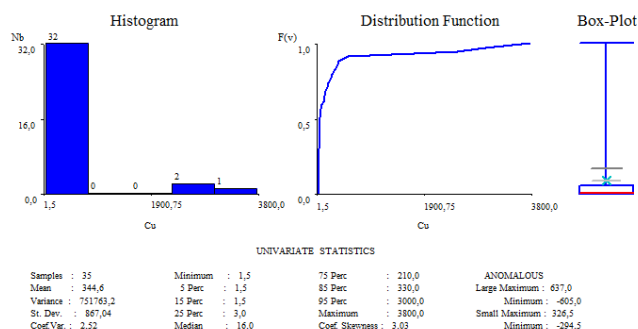
Gráfico 5.10 – Teores de Cobre das 76 amostras recolhidas no nível B.



O Gráfico 5.10 mostra que apenas 8 das 76 amostras (cerca de 10%) possuem valores acima do limite de referência.

## 5.1.2.3. NÍVEL C

Gráfico 5.11 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Cobre (nível C).

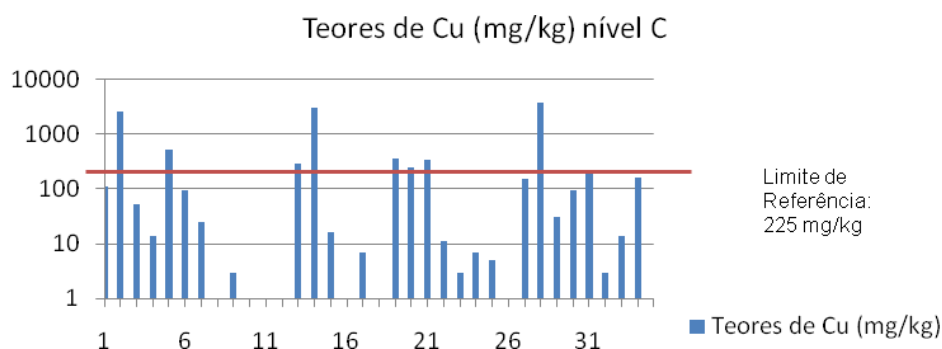


O Gráfico 5.11 apresenta para o Cu uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Cu apresenta um valor médio de 344,6 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 3800 mg/kg) e uma mediana de 16 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 16 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 75% dos dados têm valores menores ou iguais a 210 mg/kg (do valor de referência do Cu (225mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.12 ilustra a posição das amostras de Cu relativamente ao limite de referência.

Gráfico 5.12 – Teores de Cobre das 35 amostras recolhidas no nível C.



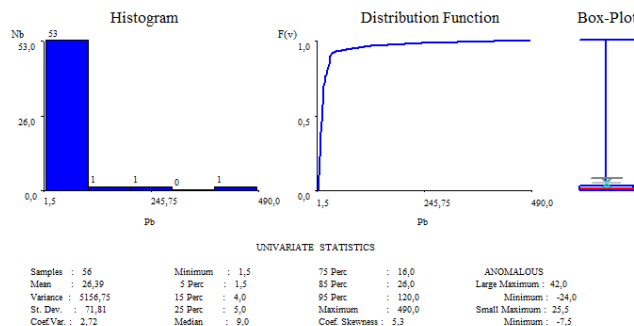
O Gráfico 5.12 mostra que apenas 8 das 35 amostras (cerca de 22%) possuem teores superiores ao limite de referência.



### 5.1.3. DISTRIBUIÇÃO DA VARIÁVEL CHUMBO NOS DIFERENTES NÍVEIS

#### 5.1.3.1. NÍVEL A

Gráfico 5.13 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Chumbo (nível A).

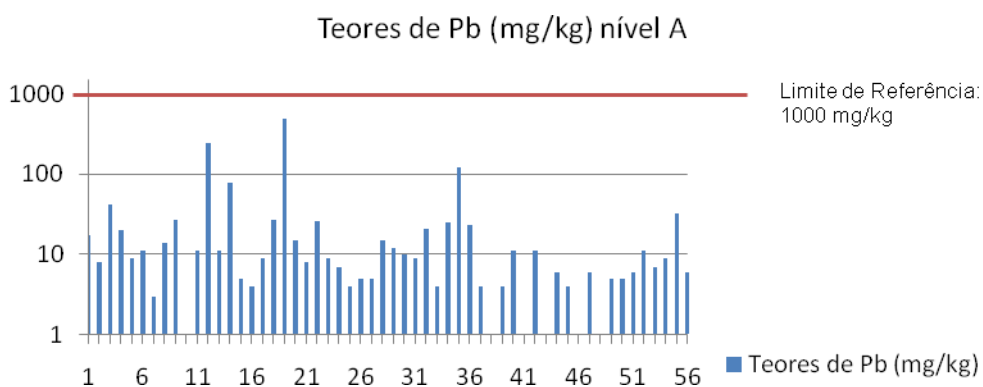


O Gráfico 5.13 apresenta para o Pb uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Pb apresenta um valor médio de 26,39 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 490 mg/kg) e uma mediana de 9 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 9 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 100% dos dados têm valores menores ou iguais a 490 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Pb (1000 mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.14 ilustra a posição das amostras de Pb relativamente ao limite de referência.

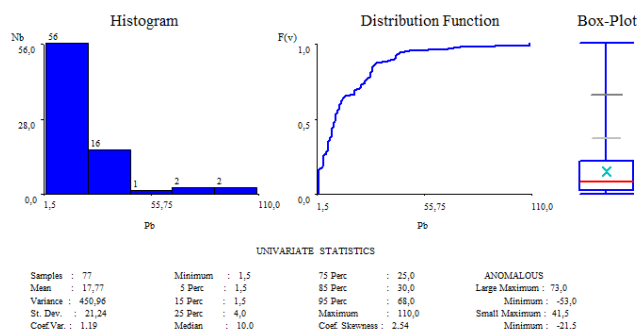
Gráfico 5.14 – Teores de Chumbo das 56 amostras recolhidas no nível A.



O Gráfico 5.14 mostra que nenhuma amostra possui um teor de Pb superior ao limite de referência.

## 5.1.3.2. NÍVEL B

Gráfico 5.15 – Histograma e Estatísticos Básicos da variável Chumbo (nível B).

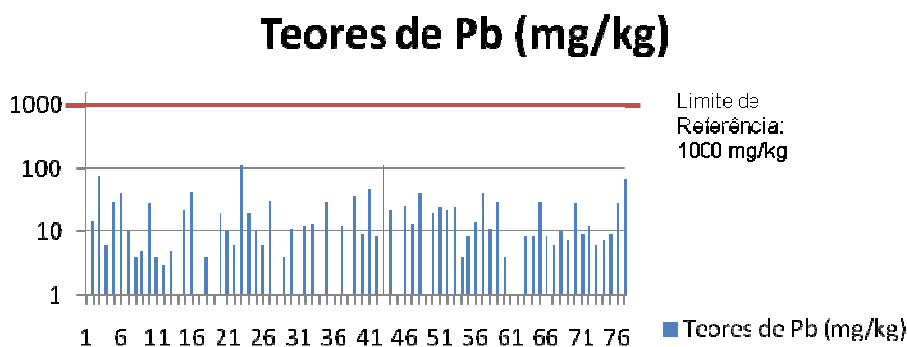


O Gráfico 5.15 apresenta para o Pb uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 1, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Pb apresenta um valor médio de 17,77 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 110 mg/kg) e uma mediana de 10 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 10 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 100% dos dados têm valores menores ou iguais a 100 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Pb (1000 mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.16 ilustra a posição das amostras de Pb relativamente ao limite de referência.

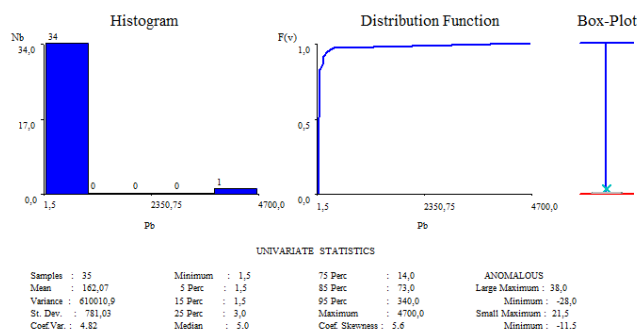
Gráfico 5.16 – Teores de Chumbo das 76 amostras recolhidas no nível B.



O Gráfico 5.16 mostra que todas as amostras apresentam teores de Pb abaixo do limite de referência.

### 5.1.3.3. NÍVEL C

**Gráfico 5.17 – Histograma e Estatísticos Básicos da variável Chumbo (nível C).**

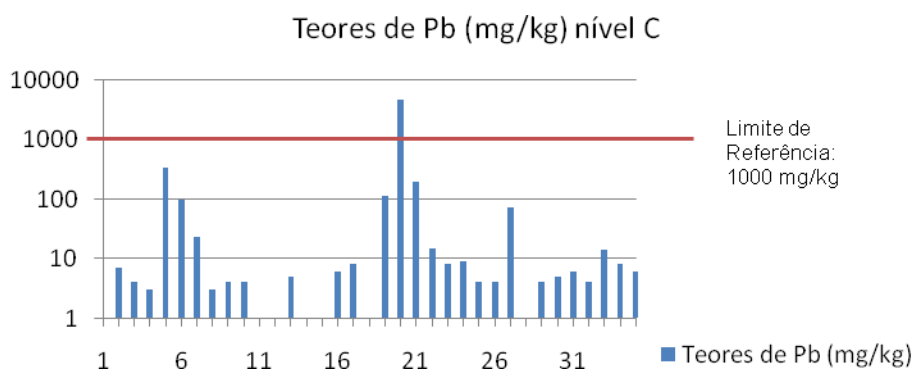


O Gráfico 5.17 apresenta para o Pb uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 4, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Pb apresenta um valor médio de 162,07 mg/kg, (com mínimo de 1,5 e máximo de 4700 mg/kg) e uma mediana de 5 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 5 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 95% dos dados têm valores menores ou iguais a 340 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Pb (1000 mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.18 ilustra a posição da variável Pb relativamente ao limite de referência.

**Gráfico 5.18 – Teores de Chumbo das 35 amostras recolhidas no nível C.**

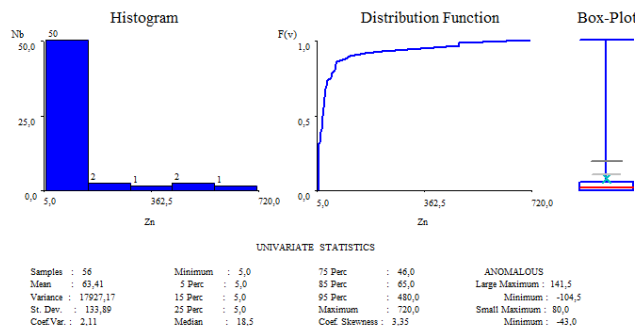


Da análise do Gráfico 5.18 conclui-se que apenas uma das 35 amostras (cerca de 2,8%) possui valor superior ao limite de referência.

### 5.1.4. DISTRIBUIÇÃO DA VARIÁVEL ZINCO NOS DIFERENTES NÍVEIS

#### 5.1.4.1. NÍVEL A

Gráfico 5.19 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Zinco (nível A).

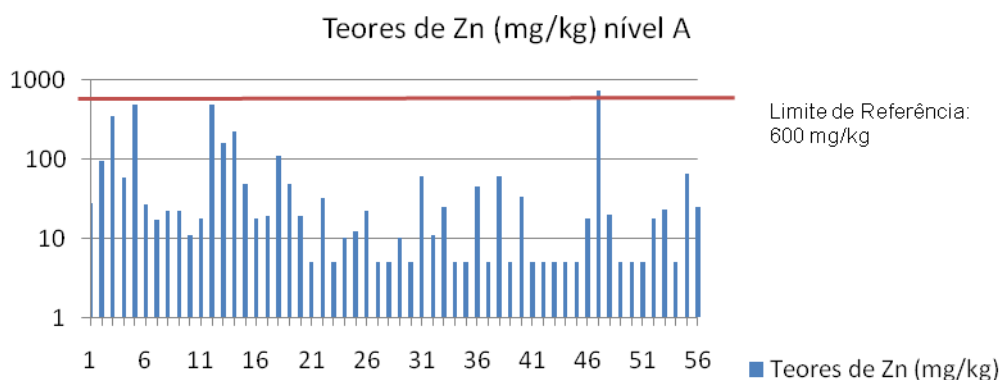


O Gráfico 5.19 apresenta para o Zn uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 2, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Pb apresenta um valor médio de 63,41 mg/kg, (com mínimo de 5 e máximo de 720 mg/kg) e uma mediana de 18,5 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 18,5 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 95% dos dados têm valores menores ou iguais a 480 mg/kg (valor abaixo do valor de referência do Zn (600 mg/kg)) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.20 ilustra a posição da variável Zn relativamente ao limite de referência.

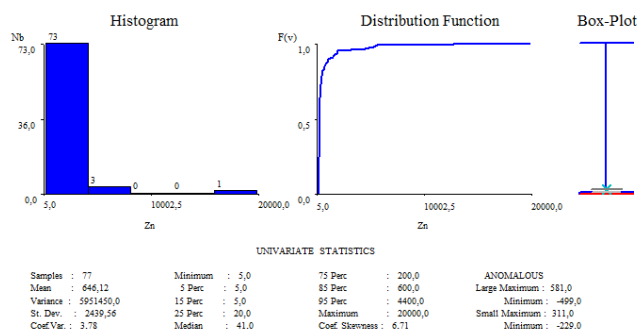
Gráfico 5.20 – Teores de Zinco das 56 amostras recolhidas no nível A.



O Gráfico 5.20 mostra que apenas uma das 56 amostras (1,78%) se encontra acima do limite de referência.

## 5.1.4.2. NÍVEL B

Gráfico 5.21 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Zinco (nível B).

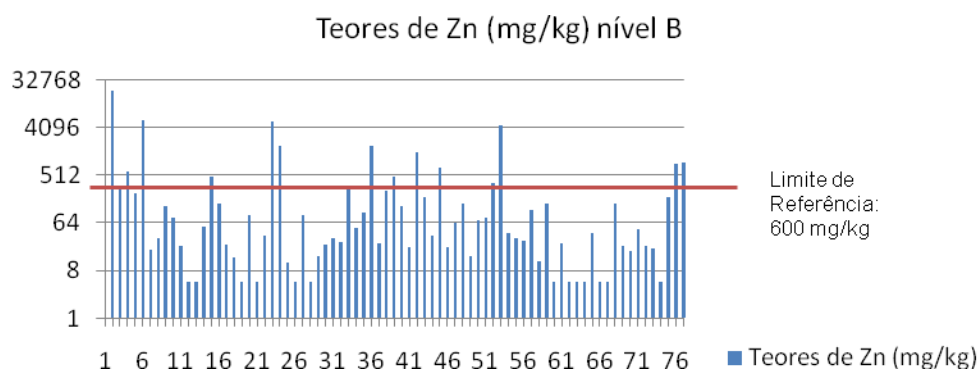


O Gráfico 5.21 apresenta para o Zn uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 3, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Zn apresenta um valor médio de 646,12 mg/kg, (com mínimo de 5 e máximo de 20000 mg/kg) e uma mediana de 41 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 41 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 85% dos dados têm valores menores ou iguais a 600 mg/kg (valor de referência do Zn) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.22 ilustra a posição da variável Zinco relativamente ao limite de referência.

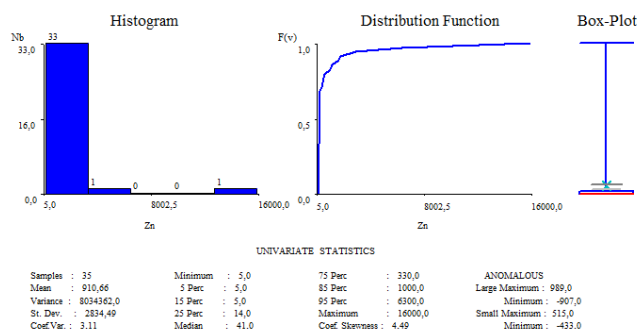
Gráfico 5.22 – Teores de Zinco das 76 amostras recolhidas no nível B.



O Gráfico 5.22 mostra que 12 das 76 amostras (cerca de 15,6%) apresentam teores de Zn superiores ao limite de referência.

## 5.1.4.3. NÍVEL C

Gráfico 5.23 – Histograma e Estatísticas Básicas da variável Zinco (nível C).

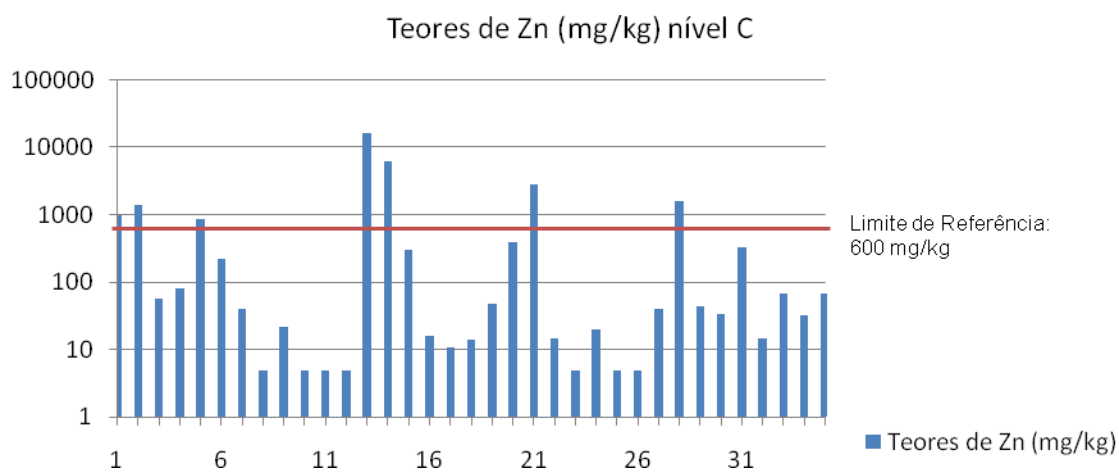


O Gráfico 5.23 apresenta para o Zn uma distribuição muito assimétrica positiva (coeficiente de assimetria ou *Skewness*) e com coeficiente de variação (*cv*) superior a 3, o que significa que deverão surgir dificuldades na estimação desta variável.

A variável Zn apresenta um valor médio de 910,66 mg/kg, (com mínimo de 5 e máximo de 16000 mg/kg) e uma mediana de 41 mg/kg, ou seja, 50% dos dados têm teores menores ou iguais que 41 mg/kg. Pela leitura do gráfico observa-se ainda que 75% dos dados têm valores menores ou iguais a 300 mg/kg (valor inferior ao valor de referência do Zn) e o conjunto dos dados para esta variável apresenta uma variância significativa.

O Gráfico 5.24 ilustra a posição da variável Zn relativamente ao limite de referência.

Gráfico 5.24 – Teores de Zinco das 35 amostras recolhidas no nível C.



O Gráfico 5.24 mostra que 6 das 35 amostras (cerca de 17%) recolhidas no nível C, apresentam teores de Zn superiores ao limite de referência.

Após a análise dos histogramas das variáveis em todos os horizontes e comparação dos teores reais com o respectivo limite de referência, segue-se o Quadro 5.2 que resume esta informação.

**Quadro 5.2 – Estatísticos Básicos dos elementos químicos nos horizontes A, B e C.**

Elemento Químico	Arsénio (AS)			Cobre (Cu)			Chumbo (Pb)			Zinco (Zn)		
Limite de Referência	40 mg/kg			225mg/kg			1000mg/kg			600mg/kg		
Nível	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C
Mínimo	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	5	5	5
Máximo	670	700	1900	450	4000	3800	490	110	4700	720	4400	6300
Média (m)	48,75	55,87	91,81	34,83	139,2	344,6	26,39	17,77	162,1	63,41	646,12	910
Desvio Padrão ( $\sigma$ )	127,05	137,4	328,49	79,26	487,5	867,04	71,81	21,24	781,03	133,9	2439,6	2834,5
Coefficiente de Variação ( $\sigma/m$ )	2,61	2,46	3,58	2,28	3,5	2,52	2,72	1,19	4,82	2,11	3,78	3,11

- À excepção do Chumbo (Pb) todos os elementos apresentam teores máximos superiores aos respectivos valores de referência em todos os horizontes.
- Todos os elementos, à excepção do Chumbo (Pb), apresentam coeficientes de variação muito elevados ( $\gg 1$ ), o que significa uma grande variabilidade dos teores dos elementos químicos nas amostras e a existência de valores extremos, factores estes que condicionam a estimação geoestatística de alguns dos elementos químicos no solo.
- Embora nem sempre apresentem valores acima do limite de referência, estes elementos químicos encontram-se em grande percentagem das amostras recolhidas.

É com base nesta análise química de contaminantes, isto é, com base nos resultados experimentais, que se vai estudar a distribuição espacial e variabilidade dos contaminantes.

## 5.2. ESTUDO DAS VARIÁVEIS: VARIOGRAFIA

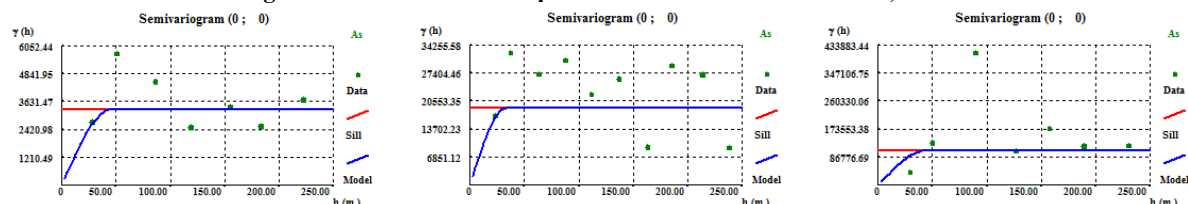
Esta corresponde à primeira etapa da caracterização do fenómeno em estudo. Como o que se pretende saber é a continuidade espacial da contaminação, separadamente para cada um dos elementos em estudo, efectuou-se o estudo variográfico para cada um, para os três níveis de profundidade considerados. Os variogramas obtidos estão representados nas figuras (Figura 5.1, Figura 5.2, Figura 5.3 e Figura 5.4) que se seguem.

A distribuição espacial das amostras bem como o número de amostras de um plano de amostragem condicionam os variogramas de qualquer variável que se pretende estudar. Como o

plano de amostragem não tem nenhuma direcção preferencial, a análise variográfica foi efectuada omnidireccionalmente, em todos os horizontes.

### 5.2.1. ARSÉNIO

**Figura 5.1 – Continuidade espacial do Arsénio nos três níveis A, B e C.**



Variograma do As – Nível A

Variograma do As – Nível B

Variograma do As – Nível C

O Quadro 5.3 resume a informação do estudo variográfico do As em todos os três horizontes.

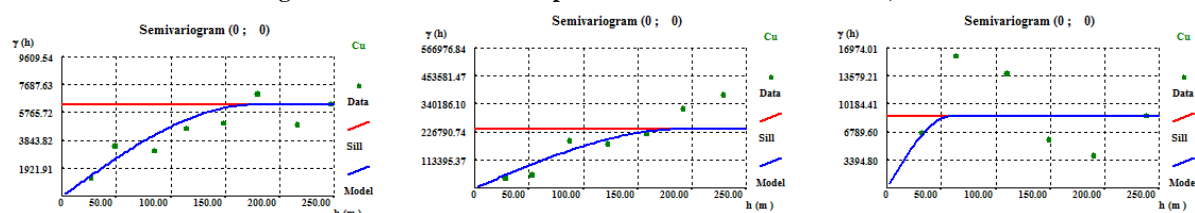
**Quadro 5.3 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Arsénio.**

Elemento	Arsénio (As)		
Nível	A	B	C
Modelo	Esférico	Esférico	Esférico
Direcção	Omnidireccional	Omnidireccional	Omnidireccional
Amplitude (a)	45m	33m	45m
Efeito de Pepita ( $C_0$ )	0	0	0
Patamar ( $C_1$ )	3281,748	18879,104	107901,388

Da análise do Quadro 5.3 conclui-se que o As tem uma continuidade espacial muito semelhante em profundidade, em todos os horizontes as amostras correlacionam-se até uma distância semelhante. Isto pode dever-se ao facto do As ser um elemento químico que possui grande mobilidade e disponibilidade em solos arenosos e em ambientes oxidantes.

### 5.2.2. COBRE

**Figura 5.2 – Continuidade espacial do Cobre nos três níveis A, B e C.**



Variograma do Cu – Nível A

Variograma do Cu – Nível B

Variograma do Cu – Nível C



O Quadro 5.4 resume a informação do estudo variográfico do Cu em todos os três horizontes.

**Quadro 5.4 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Cobre.**

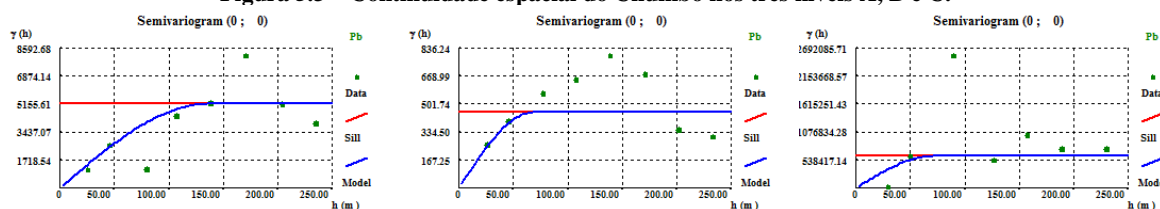
Elemento	Cobre (Cu)		
Nível	A	B	C
Modelo	Esférico	Esférico	Esférico
Direcção	Omnidireccional	Omnidireccional	Omnidireccional
Amplitude (a)	175m	190m	58m
Efeito de Pepita ( $C_0$ )	0	0	0
Patamar ( $C_1$ )	6284,766	237672,234	8666,411

Observa-se que o Cu se encontra bem correlacionado para distâncias relativamente superiores do que o elemento anterior. Nos níveis A e B essa correlação existe até às distâncias de 175 m e 190 m, respectivamente. Já no nível C os 58 m é o limite até onde existe correlação entre as amostras. Este facto pode ocorrer devido à escassez de amostras, principalmente no nível C.

A maior amplitude do Cu nos horizontes mais superficiais pode dever-se ao facto do Cu ser um elemento que possui pouca mobilidade em profundidade, tende a fixar-se nos solos mais superficiais.

### 5.2.3. CHUMBO

**Figura 5.3 – Continuidade espacial do Chumbo nos três níveis A, B e C.**



**Variograma do Pb – Nível A**

**Variograma do Pb – Nível B**

**Variograma do Pb – Nível C**

O Quadro 5.5 resume a informação do estudo variográfico do Pb em todos os níveis.

**Quadro 5.5 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Chumbo.**

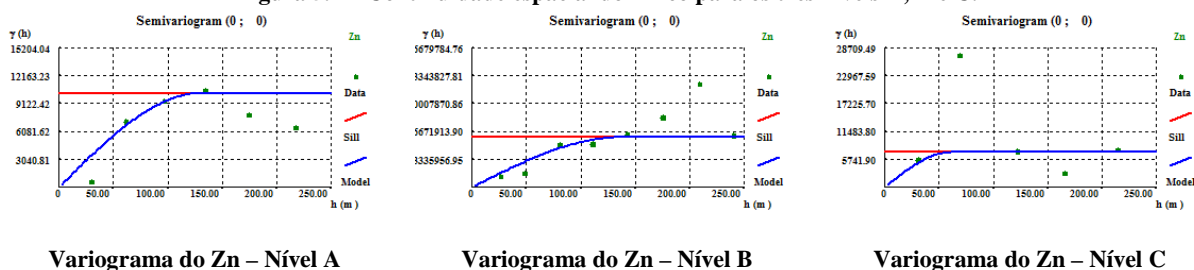
Elemento	Chumbo (Pb)		
Nível	A	B	C
Modelo	Esférico	Esférico	Esférico
Direcção	Omnidireccional	Omnidireccional	Omnidireccional
Amplitude (a)	135m	67m	70m
Efeito de Pepita ( $C_0$ )	0	0	0
Patamar ( $C_1$ )	5156,749	450,964	610010,813

A Figura 5.3 mostra a continuidade espacial do Pb para os três níveis de profundidades. No caso desta variável, pode-se afirmar que essa continuidade não é semelhante para os três níveis. O variograma do Pb no nível A representa uma variável bem correlacionada até aos 135 m. No entanto essa distância diminui no nível B e no nível C. A variância dos dados possui valores muito distintos nos três níveis.

A mobilidade do Pb em profundidade diminui bastante devido ser um elemento que possui pouca mobilidade em ambientes secundários. Quanto maior for a presença de sulfuretos menor a mobilidade do Pb pois tende a agregar-se a estes.

## 5.2.4. ZINCO

**Figura 5.4 – Continuidade espacial do Zinco para os três níveis A, B e C.**



O Quadro 5.6 resume a informação do estudo variográfico do Zn em todos os níveis.

**Quadro 5.6 – Resumo da informação obtida nos variogramas do Zinco.**

Elemento	Zinco (Zn)		
Nível	A	B	C
Modelo	Esférico	Esférico	Esférico
Direcção	Omnidireccional	Omnidireccional	Omnidireccional
Amplitude (a)	130m	135m	60m
Efeito de Pepita ( $C_0$ )	0	0	0
Patamar ( $C_1$ )	10272,244	5951455	7172,035

Da análise da Figura 5.4 pode-se afirmar que o Zn está definido como bem correlacionado pelos primeiros pares de pontos e até uma distância de 130 m e 135 m nos níveis A e B, respectivamente. No nível C essa correlação apenas existe até aos 60 m de distância.

De entre os elementos aqui referidos, o Zn é o elemento que possui a maior disponibilidade e mobilidade em ambiente secundário.

De acordo com o objectivo do presente trabalho, não foi importante avaliar a contaminação da área de estudo e respectiva análise de risco para todos os elementos. Deste modo, e com base na

análise anteriormente efectuada, seleccionou-se o zinco como sendo a variável de estudo. É com base no variograma obtido que se procederá à análise, neste caso da contaminação e respectiva avaliação do risco, daí a importância desta etapa, pois dela dependerá todos os resultados obtidos.

### 5.3. APLICAÇÃO DAS DUAS ABORDAGENS DE MODELAÇÃO GEOESTATÍSTICA

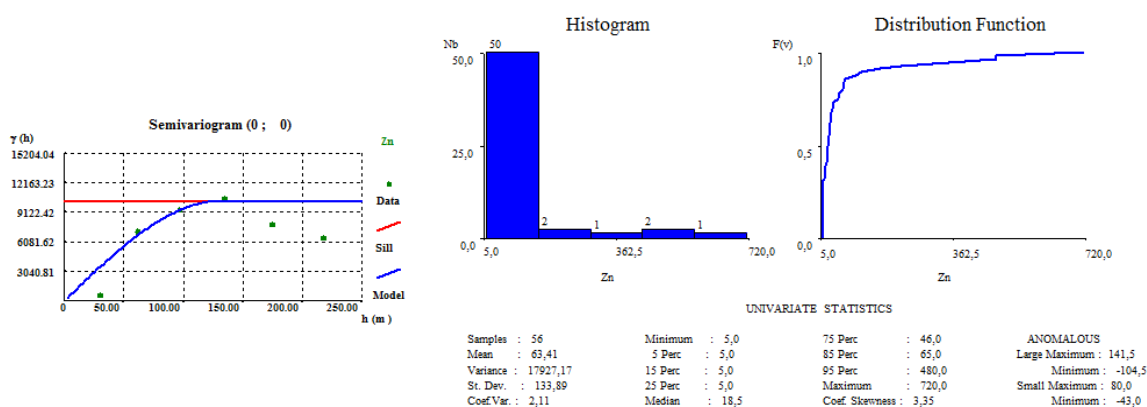
Com o objectivo de se efectuar a comparação dos resultados, isto é, as semelhanças e dissimilaridades nos resultados da avaliação do risco segundo duas abordagens distintas de modelação geoestatística, segue-se a metodologia adoptada para cada uma das abordagens.

#### 5.3.1. PRIMEIRA ABORDAGEM – ESTIMAÇÃO/SIMULAÇÃO DE TEORES DE ZINCO

##### 5.3.1.1. KRIGAGEM NORMAL DOS TEORES DE ZINCO

Esta etapa foi efectuada recorrendo ao *Software GeoMs*. Após ter sido efectuada o estudo da variável zinco e ter sido ajustado o modelo teórico que mais se aproxima à distribuição espacial desta variável, passou-se então à estimação. A Figura 5.5 apresenta, novamente, o variograma da variável Zn e o respectivo histograma.

Figura 5.5 – Variograma, Histograma e Função Distribuição da variável Zinco no nível A



De acordo com a malha utilizada e descrita no Quadro 5.7, estimaram-se os teores de zinco para o nível A.

Quadro 5.7 – Características da malha utilizada.

Coordenadas Mínimas	Coordenadas Máximas	Número de Blocos	Dimensão do Bloco
$x_{\min} = 118450$	$x_{\max} = 119650$	214	5 m
$y_{\min} = 118450$	$y_{\max} = 118450$	214	5 m

O resultado da estimação dos teores reais de Zn através da krigagem normal apresenta-se na Figura 5.6.

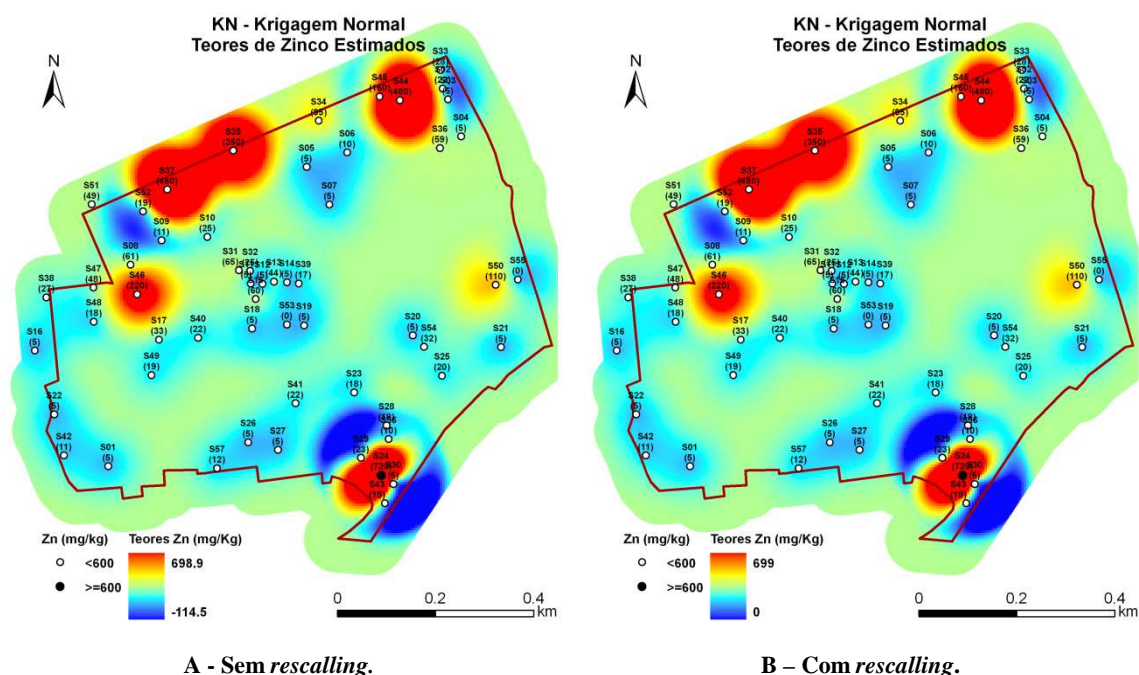


Figura 5.6 – Teores de zinco estimados por krigagem normal.

Como se pode observar na escala do mapa da Figura 5.6 (A), os valores estimados por vezes são inferiores ao valor mínimo amostrado. Isto ocorre devido ao facto do estimador impor que a soma dos ponderadores seja igual a 1, no entanto não impõe a sua positividade. Neste caso, são atribuídos maiores ponderadores às amostras em torno do ponto e ponderadores quase nulos ou mesmo negativos para amostras que se encontrem mais distanciadas do ponto, podendo dever-se ao facto de na área em estudo existirem “clusters” de amostras com valores muito elevados e muito baixos e, por outro lado, zonas pouco amostradas. Para ultrapassar este problema foi criado um código no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponível no APÊNDICE II – Rotina 1) de forma a fazer um *rescale* (alteração da escala) dos valores estimados, cujo mapa se apresenta na Figura 5.6 (B). Essa transformação de valores consistiu apenas em fazer corresponder ao valor mínimo estimado o valor zero, de forma a evitar valores de risco negativos na etapa subsequente da metodologia.

	Mínimo	Máximo	Média	Variância	Coefficiente de Skewness (cs)	Coefficiente de variação (cv)
<b>Dados</b>	5	720	63,4	17927,2	3,4	2,1
<b>KN</b>	0* <sup>1</sup>	699	57,6	3258,2	3,6	1,0

<sup>1</sup> 0\* - Este valor resulta do *rescaling* efectuado.

**Quadro 5.8 – Estatísticos básicos dos teores estimados.**

Pela leitura do quadro 5.8 conclui-se que:

- a média dos valores estimados desceu relativamente aos dados reais;
- a distribuição mantém a assimetria fortemente positiva;
- os valores máximos de teores estimados foram subestimados.

### 5.3.1.2. CÁLCULO DO RISCO CANCERÍGENO E PERIGOSIDADE OU RISCO NÃO CANCERÍGENO

Esta etapa corresponde ao cálculo do risco cancerígeno e ao cálculo da perigosidade ou risco não cancerígeno e foi desenvolvida recorrendo a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 2). Os teores de zinco estimados são transformados em índices de risco (*intake cancer*) e índices de perigosidade (*intake hazard*), de acordo com as equações do LADD e do CADD. Após esta transformação os índices de risco são multiplicados pelo factor de declive do elemento em estudo (*slope factor, SF*) originando valores de risco cancerígeno, e os índices de perigosidade ou risco não cancerígeno são divididos pela dose de referência (*reference dose, RfD*), admitida de acordo com a via de exposição em causa, originando valores de perigosidade ou risco não cancerígeno. A Tabela 5.1 apresenta os parâmetros utilizados para o cálculo dos risco cancerígeno e perigosidade estabelecidos pela USEPA.

**Tabela 5.1 – Parâmetros utilizados para o cálculo do risco cancerígeno e perigosidade ou risco não cancerígeno (USEPA, 1989).**

Parâmetros	Cenário: Adulto
Taxa de consumo para a via de exposição (mg/dia) (CR)	40
Frequência de exposição (dias/ano) (EF)	40
Duração da exposição (ano) (ED)	9
Peso corporal (kg) (BW)	70
Tempo de vida médio (dias) (LT)	70
Factor de declive cancerígeno do elemento químico (1/(mg/kg-d)) (SF)	1
Dose de referência para a via de exposição (mg/kg-dia) (RfD)	0,3
Factor de ajustamento por absorção oral de solo (mg/mg) (AAF)	1
Biodisponibilidade do elemento químico no solo (mg/mg) (BIO)	1

A Figura 5.7 apresenta o resultado da transformação de teores estimados em valores de risco cancerígeno.

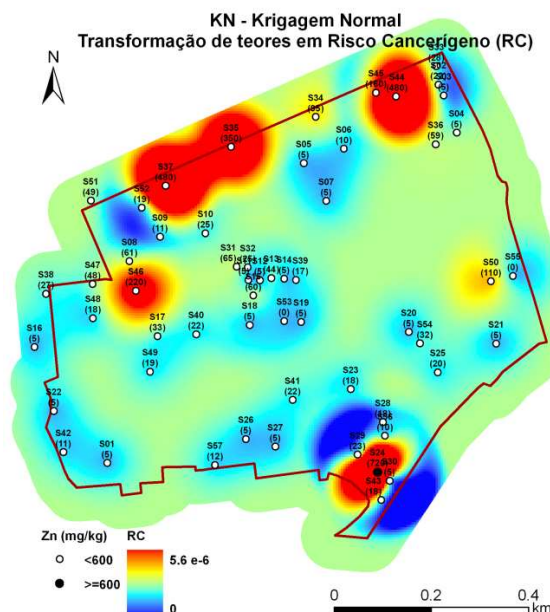


Figura 5.7 – Transformação dos teores estimados em valores de risco cancerígeno (RC).

Pela observação do mapa da Figura 5.7 pode verificar-se que:

- como seria de esperar, as manchas com valor de risco cancerígeno mais elevado rodeiam os teores reais de zinco mais elevados;
- embora existam diversas áreas que apresentam risco apenas uma das amostras apresenta teor superior ao limite de referência do Zn (600mg/kg);
- alguns teores abaixo do limite de referência apresentam risco, de onde se conclui que numa avaliação de locais contaminados, a avaliação do risco para a saúde é uma etapa fundamental pois o facto de os poluentes não apresentarem concentrações acima dos valores de referência não significa que não apresentem risco para a saúde.

A USEPA estabeleceu como valor de corte para a perigosidade o valor 1. Assim sendo, apesar da área de estudo apresentar valores de perigosidade mais elevados em torno nos teores altos de Zn e valores mais baixos em torno dos teores mais baixos de Zn, toda a área possui valores de perigosidade abaixo de 1, pelo que esse mapa não foi apresentado neste contexto, com receio que as diferentes manchas de perigosidade induzissem em erro.

### 5.3.1.3. BINARIZAÇÃO DOS VALORES DE RISCO CANCERÍGENO

Analogamente à etapa anterior, também esta foi desenvolvida recorrendo a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no ANEXO II – Rotina 2). A binarização dos valores de risco cancerígeno, processa-se do seguinte modo:

- O código lê o valor de risco cancerígeno e atribui:

$$\text{Valor Binário} = \begin{cases} 0, & \text{valor de risco cancerígeno} < 10^{-6} \\ 1, & \text{valor de risco cancerígeno} \geq 10^{-6} \end{cases}$$

O resultado da transformação apresenta-se na Figura 5.8.

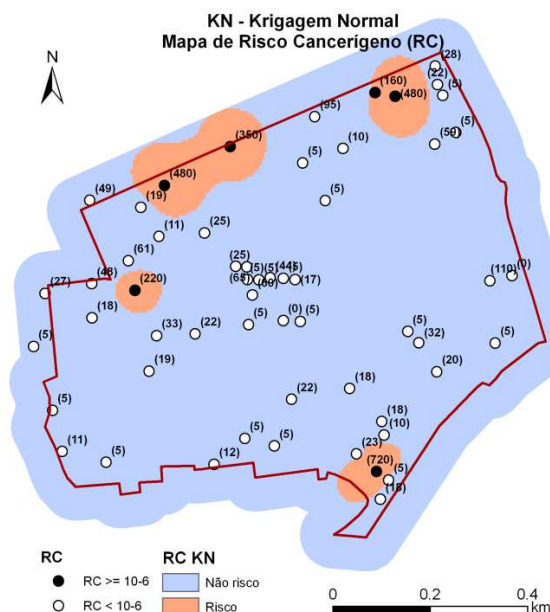


Figura 5.8 – Mapa de risco cancerígeno (RC) – Estimação por krigagem normal.

Nesta figura podem observar-se as manchas de solo contaminado com Zn, bem como os teores de Zn em cada amostra e as amostras classificadas como tendo risco cancerígeno (RC). Tal com o referido anteriormente, amostras com teores abaixo do valor de referência podem apresentar risco para a saúde.

Quadro 5.9 – Estatísticos básicos dos valores de risco das amostras e do mapa obtido por KN.

	Média	Variância	Coefficiente Skewness	Risco (%)	Não risco (%)
<b>Dados (risco)</b>	0,107	0,096	2,54	10,7	89,3
<b>KN</b>	0,0794	0,0731	4,1913	7,94	92,06

Pela leitura do Quadro 5.9 pode observar-se que, no caso de se pretender fazer a estimação de um mapa de risco a krigagem normal não será o estimador mais indicado na medida em que subestima os valores e consequentemente a proporção de risco.



#### 5.3.1.4. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL GAUSSIANA (SSG) DE TEORES DE ZINCO

Esta etapa corresponde à simulação dos teores de zinco e foi desenvolvida no *Software GeoMs*. O número de simulações que se devem efectuar deve ser tal que não se verifique uma variação muito significativa dos estatísticos dos dados experimentais e dos dados simulados.

Assim sendo, a simulação dos teores foi efectuada para 500 cenários equiprováveis de teores de zinco. Para não tornar a apresentação do trabalho exaustiva, apenas serão apresentados 2 dos 500 cenários obtidos.

Das 500 simulações efectuadas, foram escolhidas as simulações 100 e 500 (note-se que qualquer uma das 500 simulações é equiprovável de acontecer).

A malha utilizada tem as características apresentadas no Quadro 5.7. Segue-se a apresentação de 2 cenários distintos e equiprováveis de teores simulados de zinco.

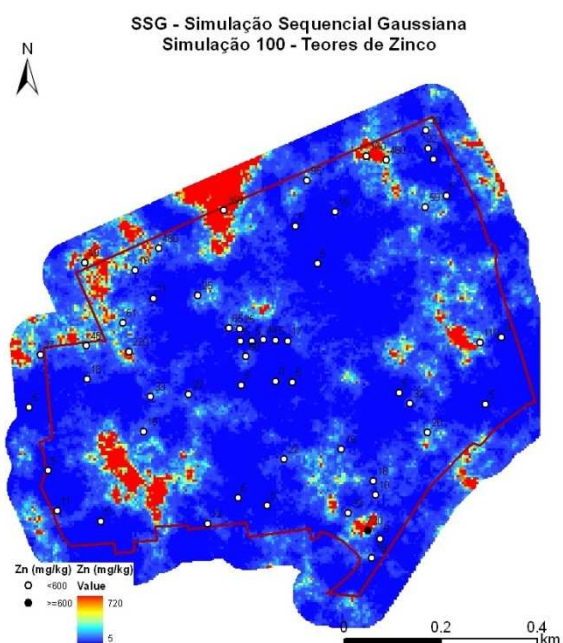


Figura 5.9 – Teores simulados de zinco (SSG - 100).

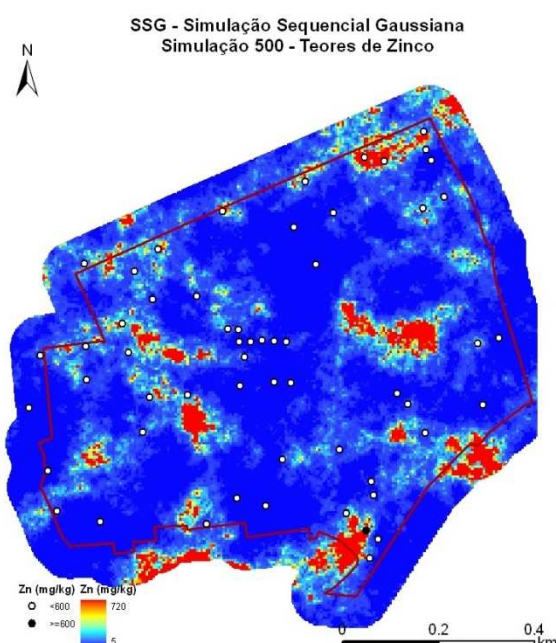


Figura 5.10 – Teores simulados de zinco (SSG - 500).

A escala de teores simulados varia entre o teor mínimo de 5 mg/kg e o teor máximo de 720 mg/kg, os quais correspondem exactamente aos teores mínimo e máximo reais, não se verificando subestimação/sobrestimação de valores máximos e mínimos, respectivamente, como observado na krigagem normal.



Com o objectivo de se verificar a fiabilidade das simulações efectuadas, há que verificar as três condições que a simulação deve obedecer, nomeadamente:

- (i) verificar o cumprimento local dos valores experimentais nos cenários simulados;
- (ii) comparar o variograma experimental com os variogramas simulados;
- (iii) comparar as proporções experimental e simulada (ALMEIDA, 1999; MATIAS, 2010).

(i) O cumprimento local dos valores experimentais nos cenários simulados é garantido pelo algoritmo utilizado, em que essa condição é garantida pelo condicionamento directo dos valores experimentais à malha de nós a simular.

(ii) A comparação dos variogramas experimental e simulados é apresentada nas Figura 5.11 e Figura 5.12.

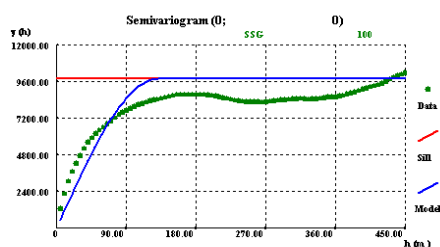


Figura 5.11 – Variograma SSG – 100.

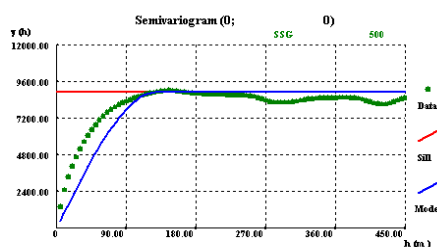


Figura 5.12 – Variograma da SSG – 500.

Observa-se que o modelo de ajustamento do variograma dos valores experimentais (modelo esférico) não se ajusta exactamente aos valores simulados por SSG, pois observando o andamento dos pontos simulados o modelo mais adequado seria o modelo exponencial. No entanto, e tal como seria de esperar, os valores do patamar das simulações são menores ou idênticos ao dos dados experimentais, o que reflecte variâncias próximas ou idênticas à dos dados experimentais. Relativamente aos dois variogramas (SSG 100 e SSG 500) o cenário 100 apresenta manchas com maior continuidade do que o cenário 500.

(iii) A comparação das proporções experimental e simulada é efectuada no Quadro 5.10 segundo os histogramas que se seguem.

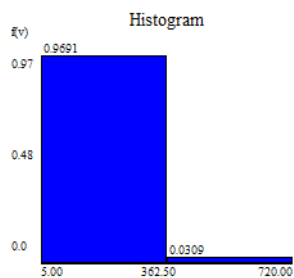


Figura 5.13 – Histograma da SSG 100.

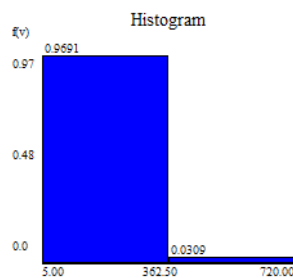


Figura 5.14 – Histograma da SSG 500.

Comparativamente aos dados experimentais, ambas as simulações apresentam diferença relativamente à proporção de valores acima do limite de referência, enquanto que apenas 1,8% dos dados experimentais apresentam teor acima de 600mg/kg de Zn os dados simulados apresentam 3%.

Classe teores Zn	Dados (%)	Simulação 100 (SSG) (%)	Simulação 500 (SSG) (%)
$\geq 600$ mg/kg	1,8	3,1	3,1
$< 600$ mg/kg	98,2	96,9	96,9

Quadro 5.10 – Proporções dos dados experimentais e das simulações (SSG).

Verifica-se que as proporções entre as duas simulações são muito semelhantes, no entanto cerca de 1% superiores à dos dados reais (para a classe  $\geq 600$  mg/kg).

Também relativamente aos estatísticos básicos a média dos teores simulados é inferior à dos dados reais.

	Média	Variância	Coefficiente de Skewness
<b>Dados</b>	63,4	17927,2	3,4
<b>SSG 100</b>	40,856	9756,73	4,648
<b>SSG 500</b>	42,4871	8923,29	4,31

Quadro 5.11 – Estatísticos básicos dos cenários 100 e 500 efectuados por SSG.

Pela comparação dos resultados apresentados pelos cenários SSG 100 e SSG 500 as condições de validação (ii e iii) da simulação não são garantidas, pelo que se optou por aferir sobre a qualidade da SSG através variação das médias e das variâncias de cada simulação, a qual se apresenta na Figura 5.15 e na Figura 5.16, respectivamente.

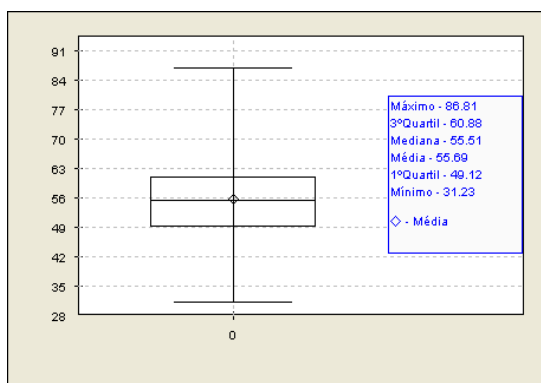


Figura 5.15 – Box-plot da média das 500 SSG.

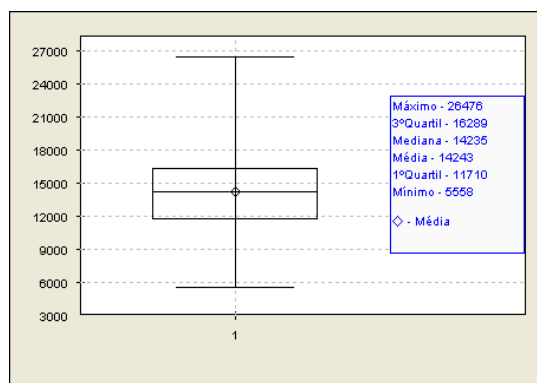


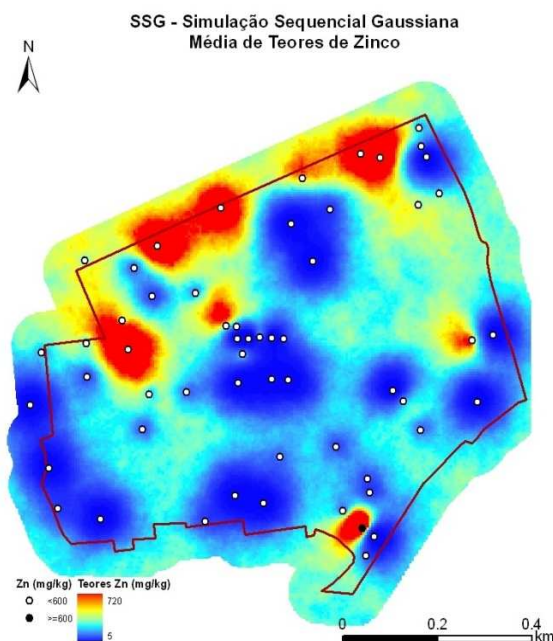
Figura 5.16 – Box-plot da variância das 500 SSG.

Pela análise das figuras anteriores conclui-se que:

- 75% das simulações apresentam um valor médio de teores inferior à média de teores das amostras reais;
- dos 500 cenários simulados existe pelo menos um cenário em que a média dos teores simulados tem o valor de 31,23 mg/kg de Zn, muito inferior à média dos dados reais (cerca de metade);
- igualmente se pode observar que dos 500 cenários simulados, pelo menos um cenário apresenta uma média de teores de 86,9 mg/kg de Zn, ou seja 2/3 superior à média dos valores reais;
- 75% das simulações apresentam variância abaixo da variância dos dados;

Pelas observações acima descrita, a SSG não apresentou resultados muito satisfatórios, o que poderá ser explicado pelo facto de este método não ser muito robusto para a simulação de distribuições fortemente assimétricas, como é o caso dos dados em estudo.

De forma a ilustrar o mapa médio das simulações, calculou-se a média dos 500 cenários equiprováveis de teores simulados. Para tal recorreu-se a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 5). O resultado dessa transformação apresenta-se na Figura 5.17.



**Figura 5.17 – Média dos teores simulados de zinco – simulação sequencial gaussiana.**

Esta transformação dos teores simulados de zinco num mapa médio de teores, serve apenas para ilustrar, como o próprio nome indica, um mapa médio de teores. A Figura 5.17 apresenta manchas de teores simulados elevados ao redor dos teores mais elevados dos dados experimentais, existindo, deste modo, uma coerência prévia entre os dados experimentais e os simulados.

#### **5.3.1.5. TRANSFORMAÇÃO DOS TEORES SIMULADOS DE ZINCO EM VALORES DE RISCO CANCERÍGENO E PERIGOSIDADE OU RISCO NÃO CANCERÍGENO**

Esta etapa consistiu na transformação dos teores simulados em valores de risco e foi desenvolvida com recurso a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 6). Criaram-se uma série de códigos que transformam directamente os teores em índices de risco (*intake cancer*) e índices de perigosidade ou risco não cancerígeno (*intake hazard*). Estes índices são calculados com base nas equações, correspondentes ao CADD e LADD. Para cada pixel, ou seja, para cada teor simulado foi calculado um índice de risco (*intake cancer*) e um índice de perigosidade ou risco não cancerígeno (*intake hazard*). O risco cancerígeno foi obtido através da multiplicação do LADD com o factor de declive cancerígeno (slope factor, SF) para o elemento em estudo, e a perigosidade ou risco não cancerígeno foi obtido através da razão entre o CADD e a dose de referência (reference dose, RfD) para a via de exposição em estudo. Este procedimento foi efectuado repetidamente para os 100 cenários de teores simulados anteriormente. Os parâmetros utilizados para o cálculo do CADD e do LADD possuem os valores descritos na Tabela 5.1.

O cálculo dos valores de risco cancerígeno e perigosidade ou risco não cancerígeno resulta em 500 cenários de risco cancerígeno e 500 cenários de perigosidade ou risco não cancerígeno, obtidos a partir dos 500 cenários de teores de zinco simulados, e apresentam-se de seguida.

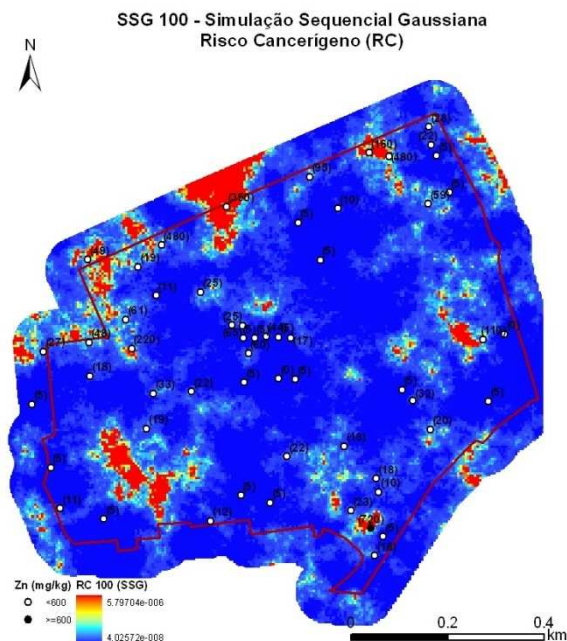


Figura 5.18 – Transformação dos teores simulados em valores de risco cancerígeno – SSG 100.

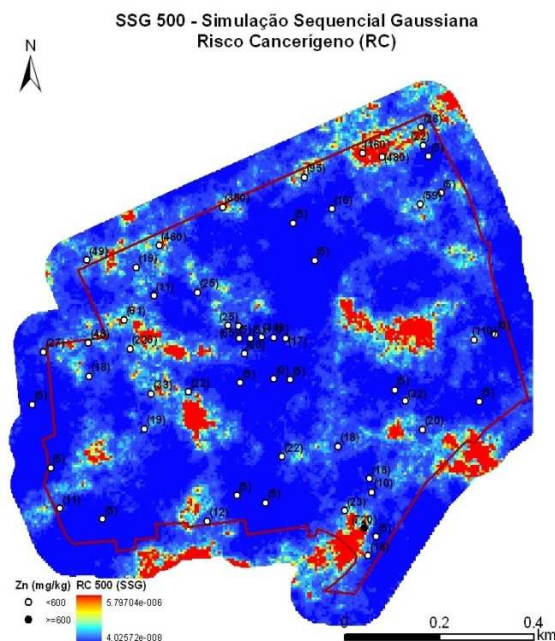


Figura 5.19 – Transformação dos teores simulados em valores de risco cancerígeno – SSG 500.

As manchas a vermelho correspondem às zonas de maior risco cancerígeno em contraste às zonas azuis que representam as zonas de menor risco cancerígeno. A USEPA considera que existe risco quando o valor é superior a  $1 \times 10^{-6}$  e que existe perigosidade quando o valor é igual ou superior a 1. A área de estudo, apresenta na sua totalidade valores de perigosidade inferiores a 1, pelo que, de acordo com o estabelecido pela USEPA não existe risco não cancerígeno ou perigosidade.

### 5.3.1.6. BINARIZAÇÃO DOS VALORES DE RISCO CANCERÍGENO E PERIGOSIDADE

Esta etapa corresponde à transformação dos cenários simulados em mapas binários (0 e 1) e foi efectuada recorrendo a códigos criados ao *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 6). A transformação dos valores de risco cancerígeno em binário, isto é, em valores 0 e 1, processa-se do seguinte modo:

- O código lê o valor de risco cancerígeno e atribui:

$$\text{Valor Binário} = \begin{cases} 0, & \text{valor de risco} < 10^{-6} \\ 1, & \text{valor de risco} \geq 10^{-6} \end{cases}$$

Esta transformação resultou em 500 mapas binários indicadores de risco cancerígeno. A Figura 5.20 e Figura 5.21 apresentam os cenários 100 e 500 dessa binarização.

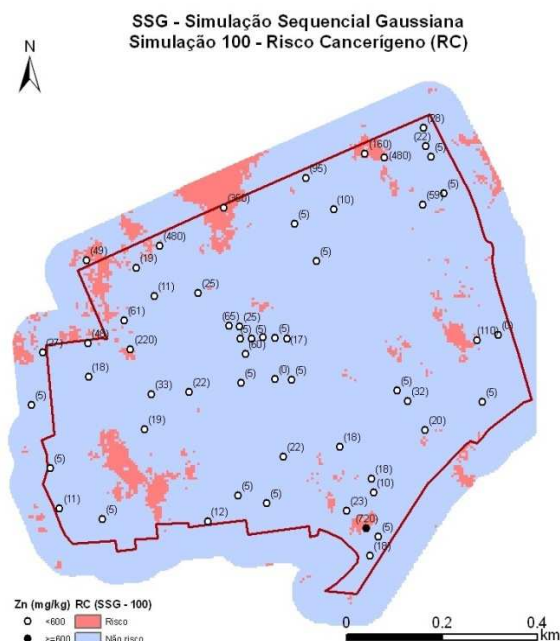


Figura 5.20 – Mapa de risco cancerígeno – SSG 100.

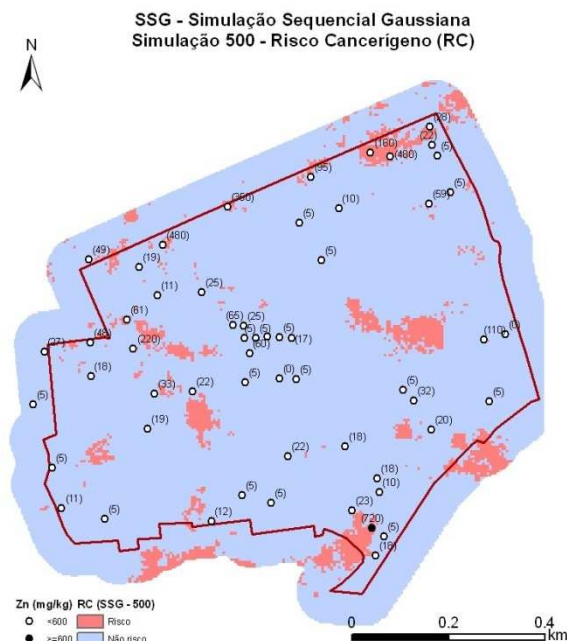


Figura 5.21 – Mapa de risco cancerígeno – SSG 500.

### 5.3.1.7. CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO CANCERÍGENO

Esta etapa corresponde ao cálculo do mapa médio com base nos 500 mapas binários obtidos na tarefa 8, e foi efectuada de acordo com os códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no ANEXO II – Rotina 7). O código calcula o mapa médio dos 500 mapas binários de risco cancerígeno. Como este mapa médio é obtido com base em mapas de valores 1 ou 0, o mapa final corresponde a um mapa de probabilidade de risco cancerígeno. A Figura 5.22 representa o mapa de risco cancerígeno do zinco, e corresponde à probabilidade de ocorrência desse mesmo risco cancerígeno.



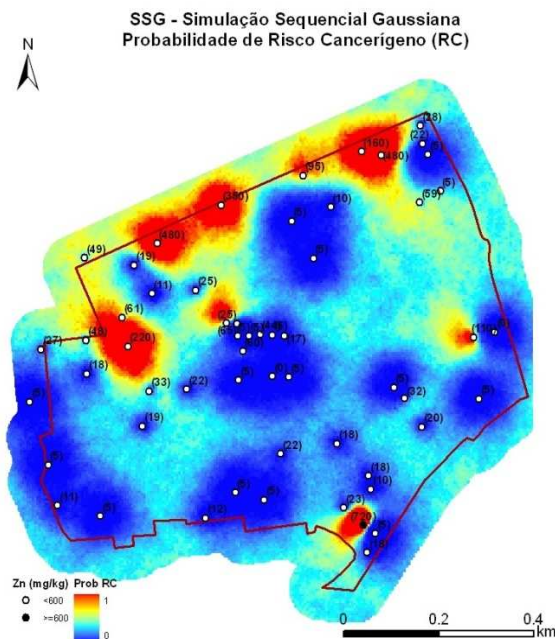


Figura 5.22 – Mapa de probabilidades de risco cancerígeno (RC) – simulação sequencial gaussiana.

### 5.3.1.8. MAPA FINAL DE RISCO CANCERÍGENO - SSG

Esta etapa corresponde à binarização do mapa representado na Figura 5.22 em valores de risco ou não risco. Assim procedeu-se à binarização dos valores de probabilidades do mapa anterior.

Deste modo, a Figura 5.23 apresenta o mapa final de risco cancerígeno obtido através do método de simulação sequencial gaussiana.

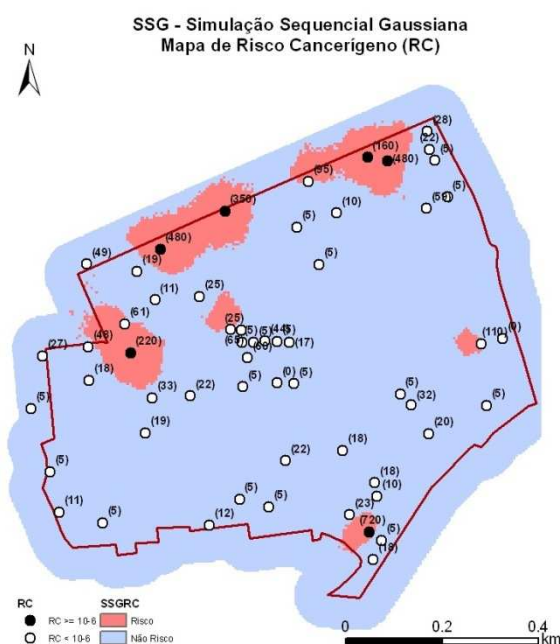


Figura 5.23 – Mapa de risco cancerígeno – simulação sequencial gaussiana.

O quadro seguinte apresenta a comparação entre os estatísticos básicos e áreas de risco dos dados reais transformados em risco e do mapa final de risco.

**Quadro 5.12– Estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos valores de risco das amostras e do mapa obtido (SSG).**

	Média	Variância	Coefficiente <i>Skewness</i> ( <i>cs</i> )	Risco (%)	Não risco (%)
<b>Dados (risco)</b>	0,107	0,096	2,54	10,7	89,3
<b>SSG</b>	0,0920	0,0835	2,8233	9,2	90,8

Tal como se pode observar pela Figura 5.23 a SSG apresenta áreas classificadas com de “risco” em locais onde os dados experimentais não apresentam risco o que pode ser explicado pelo facto dos dados originais terem uma distribuição lognormal muito acentuada e o coeficiente de variação (*cv*) ser muito elevado, ou seja, maior que 2.

Ainda relativamente ao facto de a SSG criar áreas de risco onde os dados experimentais não apresentam risco, observa-se que a mancha localizada a E no mapa apenas terá tido a influência da amostra mais próxima que apresenta um teor elevado (110 mg/kg) (tal como se pode observar na Figura 5.23), dado que o variograma utilizado na SSG tem uma amplitude de 130m. Estas considerações poderão justificar também o aparecimento de uma mancha de risco na zona central da figura.

Da análise do Quadro 5.12 verifica-se que a média e a variância dos teores reais são superiores aos teores simulados, o que pode ser justificado pela análise feita anteriormente à variação das médias e variâncias das simulações, na qual se concluiu que a SSG não é um método adequado para distribuições muito assimétricas.

### 5.3.2. SEGUNDA ABORDAGEM – ESTIMAÇÃO/SIMULAÇÃO DE ÍNDICES DE RISCO

#### 5.3.2.1. TRANSFORMAÇÃO DOS TEORES REAIS DE ZINCO EM VALORES DE RISCO CANCERÍGENO E PERIGOSIDADE OU RISCO NÃO CANCERÍGENO E RESPECTIVA BINARIZAÇÃO

Esta etapa corresponde à transformação dos teores reais de zinco em índices de risco e índices de perigosidade ou risco não cancerígeno. Efectuou-se com recurso a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 3). O código lê o teor de zinco de cada amostra e transforma-o em índices de risco (*intake cancer*) e em índices de perigosidade (*intake hazard*), de acordo com as equações do LADD e do CADD. Após esta transformação, os índices de risco são multiplicados pelo factor de declive do elemento em estudo (*slope factor, SF*) originando valores de risco cancerígeno, e os índices de perigosidade são divididos pela dose de referência (*reference dose, RfD*) admitida de acordo com a via de exposição em causa, originando valores de perigosidade ou risco não cancerígeno.



Após a transformação directa dos teores reais de zinco em valores de risco cancerígeno e perigosidade, procedeu-se à binarização dos mesmos e, à semelhança da anterior, esta transformação foi desenvolvida recorrendo a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no APÊNDICE II – Rotina 3). A transformação dos valores de risco cancerígeno e de perigosidade ou risco não cancerígeno em binário, isto é, em valores 0 e 1, processa-se do seguinte modo:

- O código lê o valor de risco cancerígeno e atribui:

$$\text{Valor Binário} = \begin{cases} 0, & \text{valor de risco} < 10^{-6} \\ 1, & \text{valor de risco} \geq 10^{-6} \end{cases}$$

- O código lê o valor de perigosidade ou risco não cancerígeno e atribui:

$$\text{Valor Binário} = \begin{cases} 0, & \text{valor de perigosidade} < 1 \\ 1, & \text{valor de perigosidade} \geq 1 \end{cases}$$

Tal como nos casos anteriores a área de estudo não apresentou perigosidade. A binarização dos teores de zinco em risco cancerígeno resultou numa nova variável, nomeadamente, a variável risco cancerígeno. Seguidamente efectuou-se a análise univariada da nova variável.

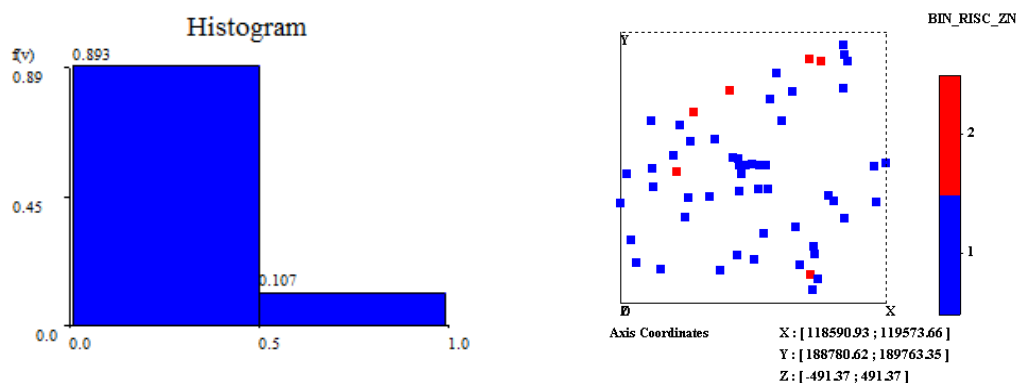


Figura 5.24 – Histograma e distribuição espacial da variável risco cancerígeno.

A classe de valor 1, a azul, representa as amostras que possuem valores de risco cancerígeno abaixo do valor de referência  $1 \times 10^{-6}$  e a classe de valor 2, a vermelho, representa as amostras que possuem valores de risco cancerígeno acima do mesmo valor de referência.

### 5.3.2.2. AJUSTE DE UM MODELO TEÓRICO À VARIÁVEL DO RISCO

Esta etapa corresponde à estimação do risco por krigagem da indicatriz e foi desenvolvida recorrendo ao *Software GeoMs*. A primeira fase desta tarefa consistiu no estudo variográfico da variável binária risco cancerígeno e do ajuste de um modelo teórico que melhor defina o tipo de distribuição. Deste modo apresenta-se o variograma representativo desta variável na Figura 5.25.

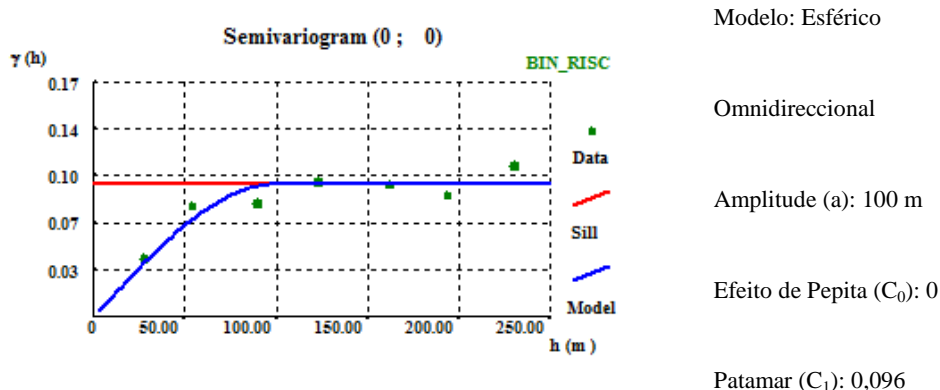


Figura 5.25 – Variograma da variável indicatriz do risco cancerígeno.

Como a área de estudo está relativamente pouco amostrada e não apresenta nenhuma orientação preferencial de amostragem, optou-se por se efectuar apenas o variograma omnidireccional, isto é, um variograma representativo de todas as direcções possíveis.

Pela análise do variograma, pode-se dizer que a variável encontra-se correlacionada até uma distância de 100m ( $h = 100\text{ m} = a$ ). Para valores de  $h > 100\text{ m}$  a variável deixa de estar correlacionada, ou seja, neste caso poderá prever-se que a dimensão média das manchas de valor 1 (ou zero) a estimar deverão ter cerca de 100m.

### 5.3.2.3. ESTIMAÇÃO DO RISCO CANCERÍGENO POR KRIGAGEM DA INDICATRIZ

Esta etapa foi efectuada recorrendo ao *Software GeoMs*. Consistiu em estimar o risco cancerígeno por krigagem da indicatriz.

De acordo com os parâmetros da malha descrita anteriormente (Quadro 5.7) foram estimados os valores da variável indicatriz (1 – risco; 0 – não risco) e obteve-se o mapa apresentado na Figura 5.26.

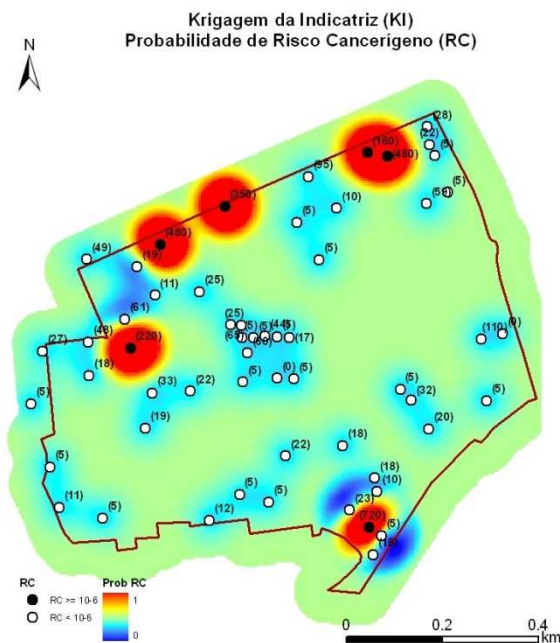


Figura 5.26 – Mapa de probabilidades de risco cancerígeno (RC) – krigagem da indicatriz.

O mapa apresentado na Figura 5.26 é obtido a partir de valores binários de risco cancerígeno, isto é, valores iguais a 1 caso representam risco e valores iguais a 0 caso contrário. Deste modo, o mapa resultante da estimação por krigagem da indicatriz representa a probabilidade de risco cancerígeno.

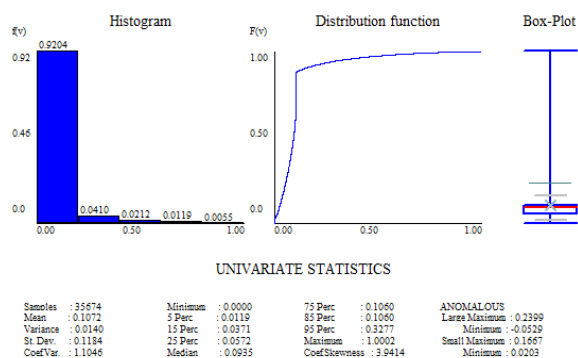


Figura 5.27 – Estatísticas da KI.

Os estatísticos da estimação por krigagem da indicatriz apresentam-se no Quadro 5.13.

	Média	Variância	Coefficiente de <i>Skewness</i> (cs)	Coefficiente de variação (cv)
Valores estimados	0.107	0.014	3.94	1.1

Quadro 5.13 – Estatísticos básicos dos valores estimados (KI).

Pelo quadro anterior observa-se que a proporção de áreas de risco é idêntica à proporção para os valores de risco nos dados reais (valor da média = 0,107).

#### 5.3.2.4. MAPA FINAL DE RISCO CANCERÍGENO – KI

Esta etapa corresponde à binarização do mapa apresentado na Figura 5.26 em valores de risco cancerígeno ou não risco. Essa transformação resultou no mapa apresentado na Figura 5.28.

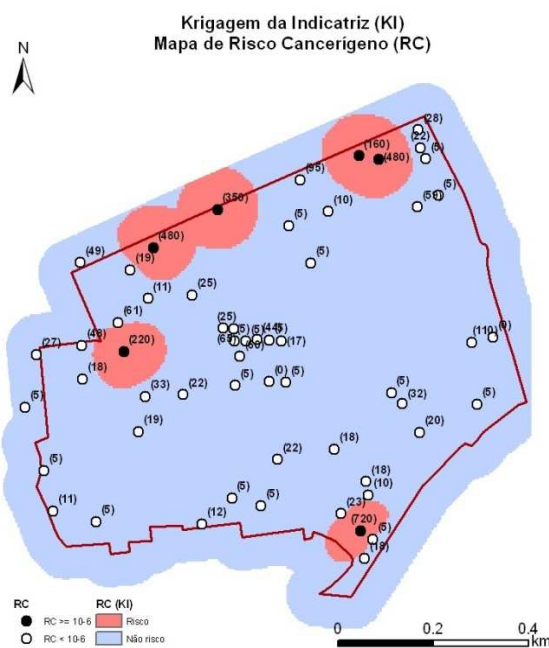


Figura 5.28 – Mapa de risco cancerígeno – krigagem da indicatriz.

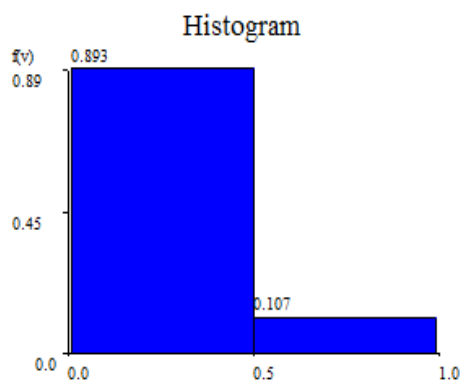


Figura 5.29 – Histograma dos dados binarizados.

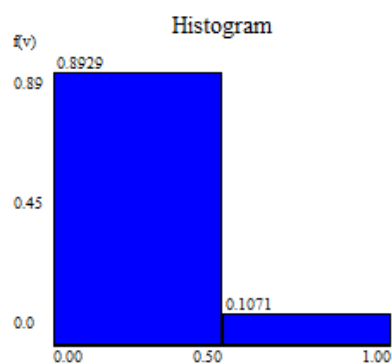


Figura 5.30 – Histograma dos valores de risco estimados.

Pode observar-se pelas figuras anteriores que os histogramas da variável indicatriz e respectivo mapa estimado são idênticos.

	Mínimo	Máximo	Média	Variância	Coefficiente de Skewness (cs)	Coefficiente de variação (cv)
<b>Dados</b>	0	1	0,107	0,1	2,54	2,9
<b>KI</b>	0	1	0,107	0,09	2,54	2,9

Quadro 5.14 – Estatísticos básicos dos valores de risco estimados.

Pela análise do quadro e das figuras anteriores conclui-se que existe uma semelhança muito significativa entre os dados reais e o mapa estimado. As manchas de risco são áreas muito regulares.

### 5.3.2.5. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ DA VARIÁVEL RISCO CANCERÍGENO

Esta etapa corresponde à simulação sequencial da indicatriz da variável risco cancerígeno e foi desenvolvida no *Software GeoMs*. O número de simulações que se devem efectuar deve ser tal que não se verifique uma variação dos estatísticos dos dados experimentais e dos dados simulados. Assim sendo, a simulação foi efectuada 500 vezes obtendo-se, deste modo, 500 mapas binários distintos e equiprováveis, indicadores de risco cancerígeno.

À semelhança do efectuado na simulação sequencial gaussiana, só se apresentam 2 cenários equiprováveis dos 500 cenários obtidos. A malha utilizada para se efectuarem as simulações tem as características apresentadas no Quadro 5.7. A Figura 5.31 e a Figura 5.32 apresentam apenas dois dos cenários obtidos, nomeadamente, o cenário 100 e o cenário 500.

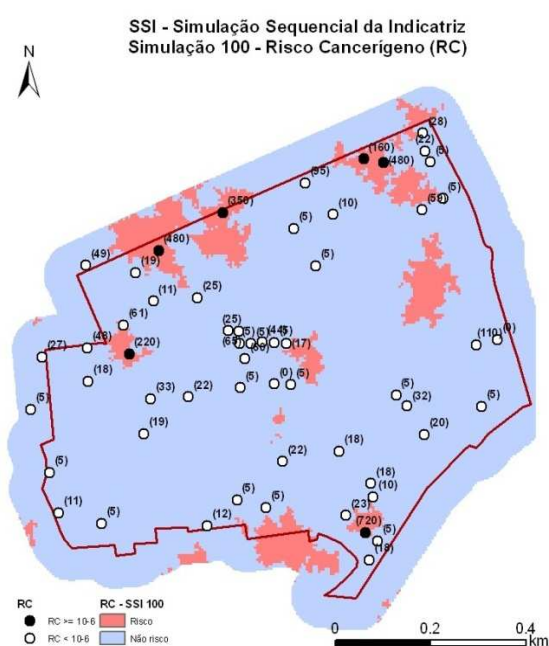


Figura 5.31 – Mapa de risco cancerígeno – SSI 100.

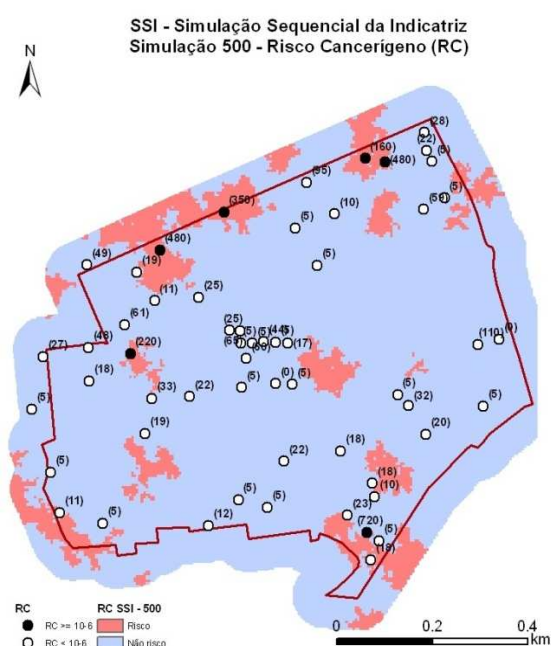


Figura 5.32 – Mapa de risco cancerígeno – SSI 500.

Da análise das figuras anteriores, pode dizer-se que as manchas a azul representam áreas desprovidas de risco cancerígeno e que as manchas a laranja apresentam áreas de risco cancerígeno. Observa-se ainda que, as amostras experimentais que apresentam risco cancerígeno estão próximas das áreas simuladas de risco.

Para se validar as simulações há que avaliar os três aspectos que a simulação sequencial exige, à semelhança do efectuado na simulação sequencial gaussiana.

A primeira condição é cumprida através da alocação directa dos dados experimentais à malha de nós a simular, pois a malha de amostragem não é regular, não podendo esta condição ser satisfeita por condicionamento exacto.

A verificação da segunda condição, ou seja, a comparação dos variogramas experimental e simulados, é efectuada de seguida na Figura 5.33 e na Figura 5.34.

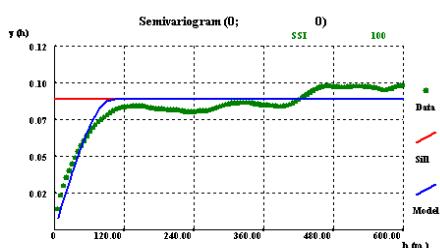


Figura 5.33 – Variograma do SSI 100.

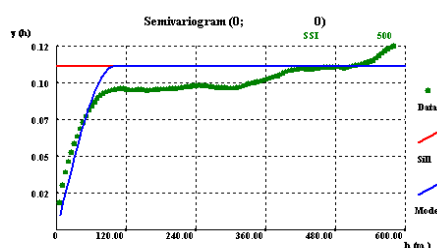


Figura 5.34 – Variograma do SSI 500.

Relativamente aos variogramas, observa-se que a função teórica que se ajustou aos dados experimentais, não se ajusta na perfeição aos dados simulados. Observa-se que os dados simulados apresentam uma maior continuidade comparativamente aos dados experimentais, apresentando também uma variância menor.

A terceira condição é assegurada fazendo a comparação entre as proporções dos dados experimentais e simulados. Essa comparação é efectuada segundo o Quadro 5.15.

Classes	Dados (%)	Simulação (SSI 100) (%)	Simulação (SSI 500) (%)
Risco	0,107	0,09	0,12
Não Risco	0,89	0,91	0,88

Quadro 5.15 – Verificação das proporções de cada classe entre os dados experimentais e as simulações sequenciais da indicatriz.

Pela leitura do quadro observa-se que as proporções de áreas de risco e não risco dos cenários SSI 100 e SSI 500 não são idênticas, embora muito semelhantes às dos dados experimentais.

De forma a aferir sobre a robustez da simulação foi realizada uma análise à variação das médias e das variâncias dos 500 cenários.

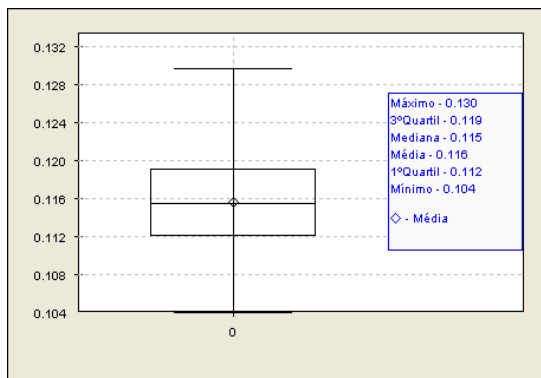


Figura 5.35 – Box-plot das médias das 500 SSI.

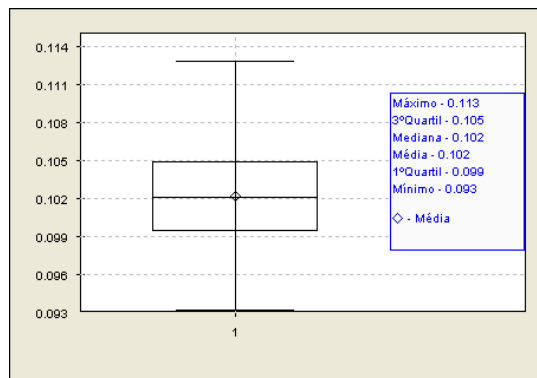


Figura 5.36 – Box-plot das variâncias das 500 SSI.

Pela análise das figuras anteriores conclui-se que:

- 50% dos cenários simulados (mediana) apresentam valores de risco médios superiores à média dos valores de risco das amostras reais;
- dos 500 cenários simulados existe pelo menos um em que a média de ocorrência de valores de risco é muito idêntica à média da probabilidade de risco dos valores reais (0,104 para os valores simulados e 0,107 para os valores reais);
- a média da variância (0,102) dos 500 cenários é ligeiramente superior à variância dos dados reais de risco (0,09).
- dos 500 cenários pelo menos um (mínimo) apresenta variância idêntica à variância dos dados reais e no máximo 25% dos cenários (1º quartil) apresentam variâncias idênticas à dos dados reais.

Pelas razões acima apresentadas e à semelhança do verificado na simulação sequencial gaussiana, a SSI revelou-se também um método pouco robusto para distribuições muito assimétricas, como é o caso dos dados de estudo. No entanto, revelou-se, comparativamente à SSG e de acordo com o exposto anteriormente, um método mais apropriado, pois apresenta as manchas de risco apenas onde existe risco para os dados originais, contrariamente ao que se observa na SSG que apresenta áreas de risco em zonas onde os dados originais não têm risco.

#### 5.3.2.6. CÁLCULO DO MAPA MÉDIO DAS PROBABILIDADES DE RISCO CANCERÍGENO

Esta etapa consiste no cálculo do mapa médio das probabilidades de risco cancerígeno e foi desenvolvida recorrendo a códigos criados no *Software Microsoft Visual Basic 6.0* (disponíveis no ANEXO II – Rotina 8). A média foi calculada a partir dos 500 cenários distintos de risco cancerígeno obtido na etapa. Deste modo, o mapa resultante representa a probabilidade de risco cancerígeno.



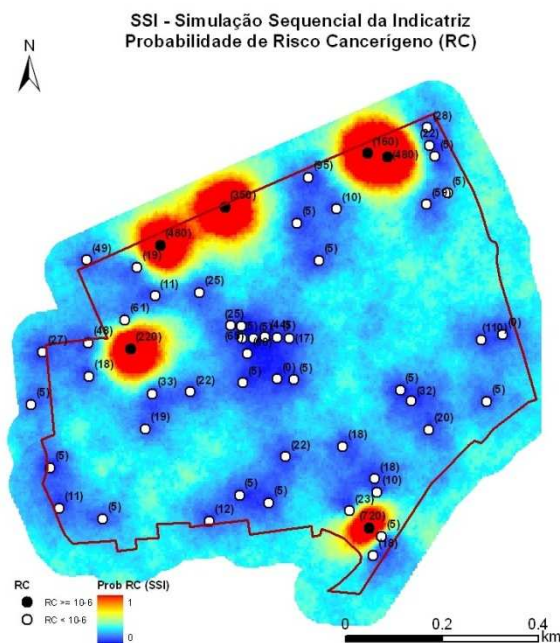


Figura 5.37 – Mapa da probabilidade de risco cancerígeno (RC) – simulação sequencial da indicatriz.

### 5.3.2.7. MAPA FINAL DE RISCO CANCERÍGENO – SSI

Esta etapa consiste na binarização dos valores de probabilidades de risco cancerígenos apresentados na Figura 5.37 em valores binários de risco cancerígeno ou não risco. Esta transformação resulta no mapa apresentado na Figura 5.38.

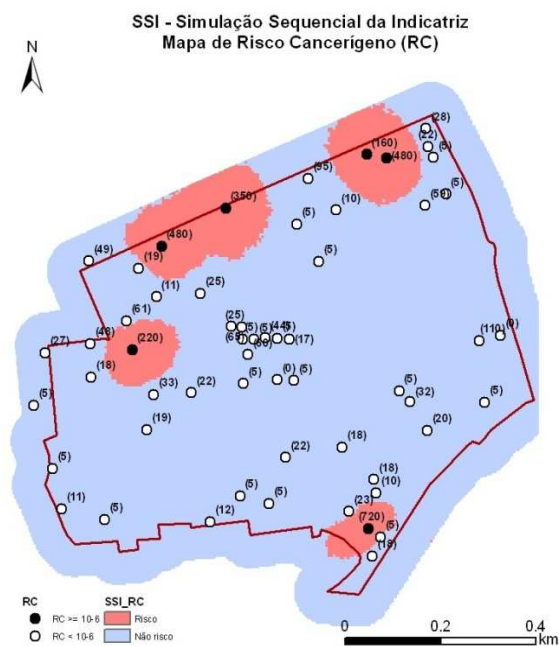


Figura 5.38 – Mapa de risco cancerígeno – simulação sequencial da indicatriz.



Na Figura 5.39 e na Figura 5.40 apresentam-se os histogramas dos valores reais de risco e do mapa final de risco binarizado e no Quadro 5.16 os estatísticos básicos dos valores de risco das amostras respectivo mapa final de risco simulado por SSI.

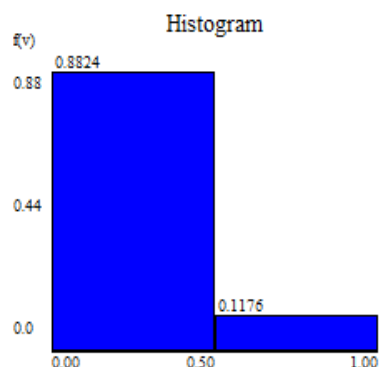
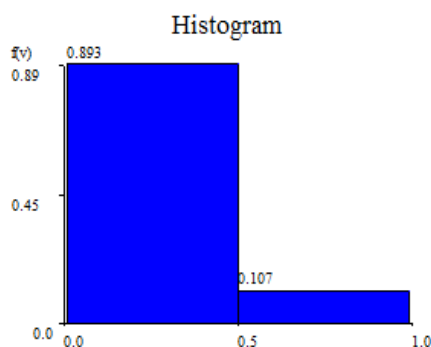


Figura 5.39 – Histograma dos valores reais de risco. Figura 5.40 – Histograma do mapa final de risco (SSI).

Quadro 5.16– Comparação de estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos dados reais transformados em risco do mapa obtido da simulação sequencial da indicatriz.

	Média	Variância	Coefficiente <i>Skewness</i> ( <i>cs</i> )	Risco (%)	Não risco (%)
<b>Dados (risco)</b>	0,107	0,096	2,54	10,7	89,3
<b>SSI</b>	0,118	0,1037	2,37	11,8	88,2

Pela observação das figuras e do quadro anterior conclui-se que este método de simulação apresenta resultados satisfatórios para o objectivo deste estudo: avaliação das áreas de risco, embora a proporção de áreas de risco seja ligeiramente superior à proporção de risco nas amostras originais (cerca de 1% superior), o que pode ser aceite como estando do lado da segurança.

## 6. COMPARAÇÃO DE RESULTADOS

De acordo com os objectivos do presente trabalho, isto é, modelação da contaminação de terrenos e avaliação do risco seguindo duas abordagens distintas de modelação matemática, apresentam-se seguidamente os quatro mapas finais de risco cancerígeno, obtidos a partir do desenvolvimento de cada um dos 2 métodos desenvolvidos em cada abordagem.

Da primeira abordagem, em que os dados de partida foram os teores experimentais de zinco, obtiveram-se dois mapas distintos, um resultante da estimação por krigagem normal e outro resultante da simulação sequencial gaussiana.

Da segunda abordagem, resultaram também dois mapas de risco cancerígeno, o primeiro obtido através da estimação por krigagem da indicatriz e o segundo obtido pela simulação sequencial da indicatriz, ambos os métodos desenvolvidos a partir de índices de risco cancerígeno.

Assim sendo, apresenta-se no Quadro 6.1 os estatísticos referentes às imagens finais dos métodos utilizados bem como as respectivas imagens estimadas/simuladas (Figura 6.1, Figura 6.2, Figura 6.3 e Figura 6.4).

**Quadro 6.1 – Estatísticos básicos e áreas de risco cancerígeno dos mapas obtidos.**

	Média	Variância	Risco (%)	Não risco (%)
<b>Dados (risco)</b>	0,107	0,096	10,7	89,3
<b>KN</b>	0,079	0,073	7,9	92,06
<b>SSG</b>	0,092	0,084	9,2	90,8
<b>KI</b>	0,107	0,095	10,7	89,38
<b>SSI</b>	0,118	0,104	11,8	88,2

Como já foi referido anteriormente e pela leitura do quadro anterior verifica-se que o método da krigagem da indicatriz é o que apresenta resultados mais satisfatórios relativamente à média e à variância comparativamente à dos dados originais.

Observa-se também que a tanto a krigagem normal como a SSG não reproduzem a proporção real dos valores de risco das amostras, pois ambos os métodos subestimam a proporção das áreas de risco, em particular a krigagem normal, já que esta tem tendência a subestimar as classes de valores mais elevados.

Por outro lado, a SSI sobrestima a proporção de risco simulado em cerca de 1,1%, o que poderá ser aceite num estudo desta natureza numa perspectiva de cenário mais pessimista (ou seja, do lado da segurança).

Observa-se ainda, que a krigagem da indicatriz é o método que melhor reproduz a realidade, visto apresentar proporções de risco idênticas às proporções dos dados reais.

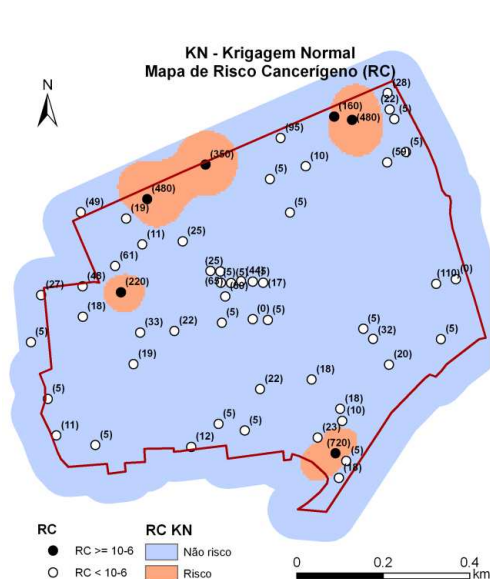


Figura 6.1 – Mapa de risco cancerígeno (KI).

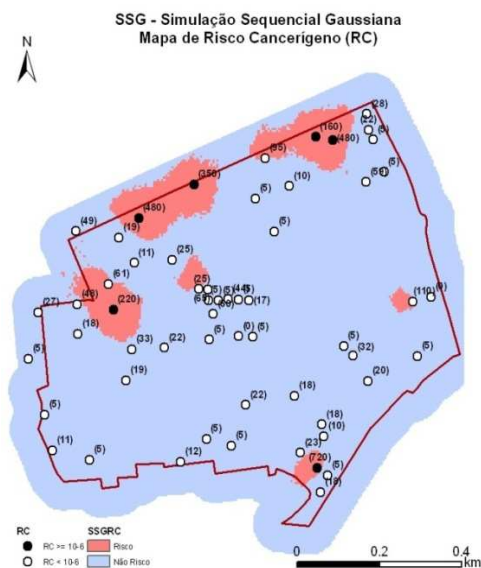


Figura 6.2 – Mapa de risco cancerígeno (SSG).

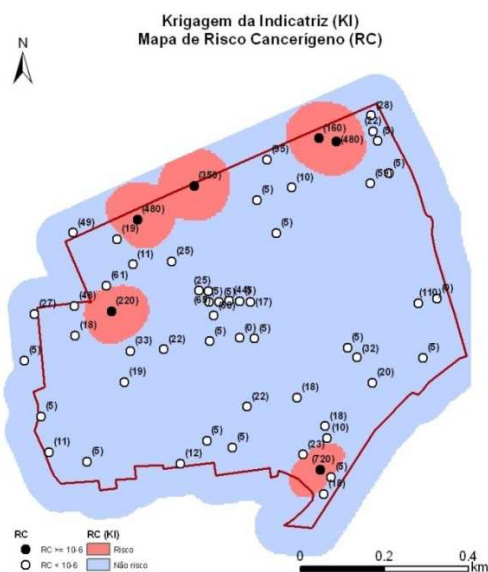


Figura 6.3 – Mapa final de risco cancerígeno (KI).

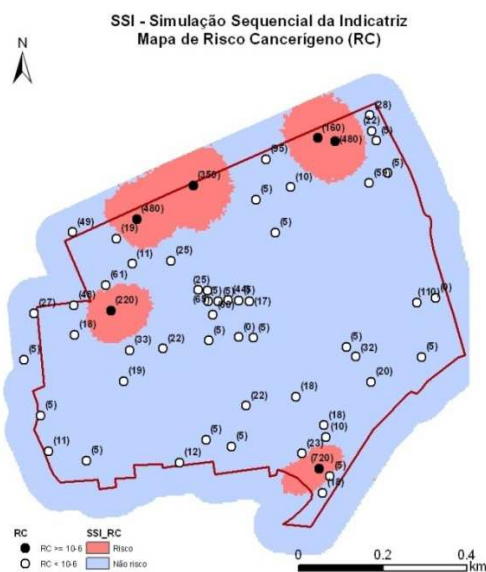


Figura 6.4 – Mapa final de risco cancerígeno (SSI).

Paralelamente a esta comparação de resultados obtidos, achou-se interessante efectuar uma análise à forma das áreas de risco obtidas pela krigagem da indicatriz e pela simulação sequencial da indicatriz, visto serem os dois métodos com resultados mais satisfatórios.

### AVALIAÇÃO DA FORMA DAS ÁREAS DE RISCO

Para a selecção de uma tecnologia de remediação para a descontaminação de solos, deverão ser considerados, além da tipologia e propriedades físico químicas dos poluentes e do meio onde ocorrem, outros factores, de natureza tecnológica e operacional, de forma a otimizar a eficácia do(s) tratamento(s), o tempo e custos de operação, em conformidade com a garantia de redução de risco e mérito ambiental a atingir com os trabalhos de descontaminação.

Assim, de forma a inferir sobre a eficiência de uma determinada tecnologia em termos de operacionalidade no terreno torna-se importante avaliar sobre as características geométricas das áreas sujeitas a intervenção, nomeadamente no que diz respeito à forma (em termos de regularidade), dimensão, continuidade e contiguidade espacial das manchas contaminadas, com vista a promover o ratio benefício/custo do plano de descontaminação

Neste contexto efectuou-se uma análise expedita da forma (em termos de regularidade) e estrutura das áreas de risco (estimadas ou simuladas) obtidas:

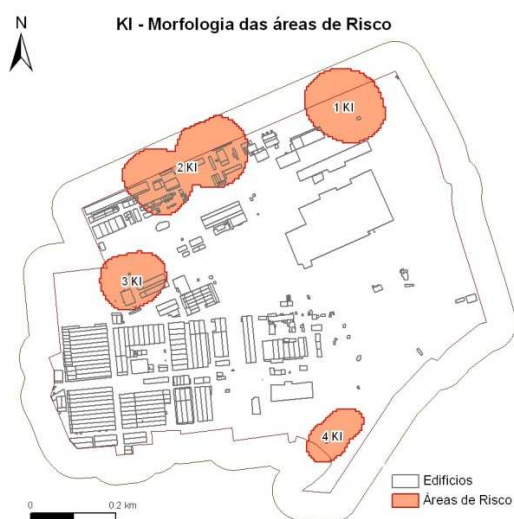


Figura 6.5 – Morfologia das áreas de risco (KI).

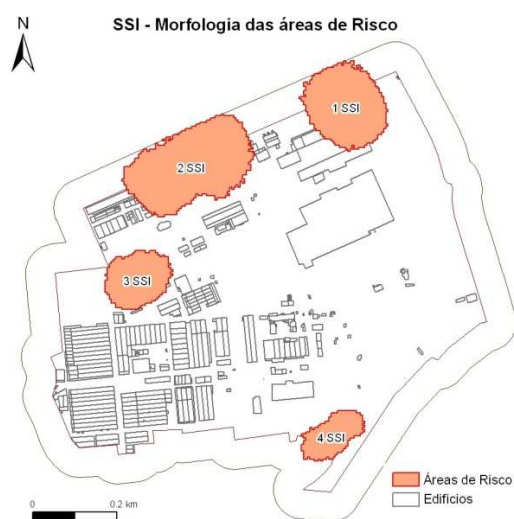


Figura 6.6 – Morfologia das áreas de risco (SSI).

Pela observação das figuras anteriores, pode-se concluir que a irregularidade das áreas de risco no mapa da SSI é bastante significativa comparada com as áreas de risco da KI. Numa fase posterior de descontaminação de terrenos é mais vantajoso, em termos de planeamento e operacionalidade, a selecção de áreas mais regulares, neste caso, as obtidas pelo método da krigagem da indicatriz.

## 7. CONCLUSÕES

Este estudo teve como objectivo a caracterização da contaminação de terrenos contaminados e respectiva análise de risco para a saúde humana. Para tal, foram desenvolvidas duas abordagens distintas: a estimação/simulação de teores reais de Zn e a estimação/simulação de valores de risco das amostras experimentais.

O cálculo do risco é um processo que depende de vários parâmetros que, de acordo com os cenários de uso futuro do local, podem variar. Para um determinado caso de estudo, se esses parâmetros forem estabelecidos e mantidos constantes, pode-se afirmar que o cálculo do risco é um processo linear. No presente trabalho, esses parâmetros foram mantidos constantes, pelo que, se considerou o cálculo do risco como sendo um processo linear.

Sendo a análise de risco um processo que, em primeiro lugar, depende do teor do elemento contaminante e, em que a cada teor é atribuído um determinado valor de risco, é de salientar a elevada importância que os valores extremos da população apresentam, nomeadamente os mais elevados. Estes valores extremos são o alvo principal deste tipo de estudo, pois a teores elevados de um determinado elemento contaminante estará associado um valor de risco mais elevado.

É de referir a importância que os valores de referência estabelecidos têm neste tipo de estudos, pois servem como *threshold* ou valor de corte durante a avaliação do risco. No entanto, é de referir que os valores de referência não devem ser considerados como um valor de corte absoluto, isto é, estando um determinado teor acima do valor de referência é de prever que este apresente risco, mas o facto de um teor estar abaixo do limite de referência não é correcto considerar que este não apresenta risco (como verificado no presente estudo). É neste contexto, e numa perspectiva de remediação, que se aplica o conceito de “até que valores se deve descontaminar”. Este conceito dependerá claramente do contaminante em causa, do tipo de uso futuro dos terrenos e de um factor muito importante que é o custo associado à remediação.

No caso da caracterização de plumas de contaminação é importante que os resultados obtidos pela modelação sejam o mais realistas possível, ou seja, que evitem a sobrestimação ou subestimação de áreas que à partida não estão contaminadas e tenham sido estimadas/simuladas como tal ou, pelo contrário, áreas que estando contaminadas tenham sido classificadas como não contaminadas.

No primeiro caso (numa perspectiva mais pessimista, e como tal do lado da segurança) o custo de remediação dos terrenos será mais elevado do que o necessário, podendo até inviabilizar o projecto de descontaminação dos terrenos.

Por outro lado, e numa perspectiva “mais optimista”, ou seja, classificar áreas contaminadas como sendo áreas não contaminadas (caso da subestimação de áreas contaminadas, como se verificou com o método da krigagem normal) o risco que se corre é o de, a médio/longo prazo os prejuízos na saúde e/ou no ambiente serem superiores aos necessários, sendo assim preferível utilizar métodos mais conservadores.

Particularizando os resultados obtidos por cada um dos métodos refere-se que: (i) o método da krigagem normal apresentou-se pouco robusto para este tipo de estudo, pois subestimou as classes de teores extremos (altos e baixos), o que se reflectiu numa diminuição dos valores de risco e consequentemente na redução das áreas de risco; (ii) embora o método da simulação sequencial gaussiana respeite os valores experimentais em cada ponto amostrado, apresentou cerca de 75% dos cenários simulados com média inferior à média dos dados experimentais, o que em termos práticos se reflectiu numa redução das áreas e simultaneamente na simulação de risco em zonas onde as amostras experimentais não o apresentam; (iii) ambos os métodos krigagem da indicatriz e simulação sequencial da indicatriz apresentaram resultados satisfatórios para a inferência da morfologia de zonas de risco, em particular porque utilizam o formalismo da indicatriz, que de certa forma atenua a forte assimetria da distribuição dos dados experimentais.

Comparando os resultados obtidos pelos dois métodos anteriores, o da krigagem da indicatriz apresentou as áreas de risco com morfologia mais regular do que a simulação sequencial da indicatriz, o que numa fase posterior de descontaminação de terrenos, é mais vantajoso em termos de planeamento e operacionalidade na selecção das técnicas de remediação mais adequadas.

## 8. BIBLIOGRAFIA

- ALMEIDA, J.A. (1999) – Use of Geostatistical Models to Improve Reservoir Description and Flow Simulation in Heterogeneous Oil Fields – Tese de Doutoramento, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- ALMEIDA, J.A., SANTOS, E. & BIO, A. (2004) – Characterization of population and recovery of Iberian hare in Portugal through direct sequential co-simulation, In Sánchez-Vila, X., Carrera, J., & Gómez-Hernandez, J. J. (eds.) *geoENV IV - Geostatistics for Environmental Applications*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 127-138, ISBN 1-4020-2114-3 (PB).
- BATISTA, M.J (2003) - Comportamento de elementos químicos no sistema rocha-solo-sedimento-planta na área mineira de Neves Corvo: Implicações Ambientais. Dissertação Doutoramento Univ.Aveiro, 393p.
- BRITO, M.G., (2005) - Metodologia para Avaliação e Remediação da Contaminação por Metais Pesados em Áreas Industriais Degradadas. Tese de Doutoramento, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa.
- BRITO, M.G; C.N. COSTA; D. VENDAS (2007) - Methodological Approach for Ground Contamination Assessment and Remediation of Brownfields. *Proceedings of the 5th WSEAS International Conference on Environment, Ecosystems and Development (EED'07)*. Puerto de La Cruz, Tenerife. WSEAS press. ISBN: 978-960-6766-20-6, ISSN: 1790-5095. 288-293pp.
- COSTA, C. (Ed.) (2001) - Investigation Methods on Soil Contamination. *Proc. Intern. Conf. Investigation Methods Soil Contamination*, Lisbon 1999, 150 p.
- DIRETIVA 93/67/CEE de 20 de Julho de 1993 que estabelece os princípios para a avaliação dos riscos para o Homem e para o ambiente das substâncias notificadas em conformidade com a Directiva 67/584/CEE do conselho.
- DURÃO, R.M. / PEREIRA, M.J. / COSTA, A.C. / CORTE-REAL, J.M. / SOARES, A. 2009 - Indices of precipitation extremes in Southern Portugal - a geostatistical approach *Natural Hazards and Earth System Sciences*- 9(1):241-250
- WEBER (2005) – Estudo do Potencial de Contaminação na Zona 2 do Parque Empresarial do Barreiro, Relatório Final, Resumo Não Técnico, Agosto 2006; relatório interno realizado por Weber Portugal Egiamb; Ciga para o PEB.
- GEOMS – Geostatistical Modelling Software, (v.1.0). Manual de utilização do geoMS – CMRP-IST (1999), Lisboa, 137 p.
- GOOVAERTS, P. (1997) - *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. Oxford Univ. Press, New York, XIV + 483 p.
- ISAACS, E. H. & SRIVASTAVA, R. M. (1989) – *An Introduction to Applied Geostatistics*. Oxford Univ. Press, New York, 561 p.
- IRIS, USEPA (1989), Integrated Risk Information System. Disponível em:  
<http://www.epa.gov/iris/>

INR, Instituto Nacional de Resíduos. Disponível em:

<http://www.inresiduos.pt/>

- JOURNEL, A. & HUIJBREGTS, C. J. (1978) - Mining Geostatistics. Academic Press, London, 600 p.
- JOURNEL, A. (1993) – Modelling uncertainty: some conceptual thoughts. Geostatistics for the next century. Kluwer Academic Press. Holanda, pp.30-43
- LA GRECA, M. D., BUCKINGHAM, P. L. & EVANS, C. (2001) – Hazardous Waste Management and Environmental Resources Management, MacGraw-Hill, NY.
- MATIAS, F. V. (2010) – Modelação 3D de um Subsector das Mineralizações Auríferas de Casas Novas, Montemor-o-Novo – Tese de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa.
- MUGE, F., SOUSA, A. J., BRITO, G., PINA, P. & ALMEIDA, J. (1993) - Characterization of Ornamental Rock Deposits Quality. 3rd Codata Conf. Geomathematics Geostatistics, Ensched, vol.2, pp. 260-273
- OMEE, 1997 – Ontario Ministry of Environment and Energy (OMEE), Guidelines for Use at Contaminated Sites in Ontario (Revised February 1997) - Queen's Printer Ontario, 1997.
- PAIS J., C. MONIZ, J. CABRAL, J. L. CARDOSO, P. LEGUINHA, S. MACHADO, M.A. MORAIS, C. LOURENÇO, M. L. RIBEIRO, P. HENRIQUES, P. FALÉ (2006a). Carta Geológica de Portugal; Folha 34 – D na escala de 1/50 000.
- PAIS J., C. MONIZ, J. CABRAL, J. L. CARDOSO, P. LEGUINHA, S. MACHADO, M.A. MORAIS, C. LOURENÇO, M. L. RIBEIRO, P. HENRIQUES, P. FALÉ (2006b). Notícia Explicativa da Folha 34 – D Lisboa; Departamento de Geologia - Departamento Nacional de Engenharia, Tecnologia e Inovação; Lisboa 2006
- PEREIRA, M.J., J. ALMEIDA, C. COSTA & A. SOARES (2001) – Accounting for soft information in mapping soil contamination with TPH at an oil storage site. In geoENV III, Geostatistics for Environmental Applications, P. Monastiez, D. Allard, and R. Froidevaux (eds.), Kluwer Academic Publishers: 475-486, ISBN: 0-7923-7107-0 (PB).
- PEREIRA, M. J., ALMEIDA, J. A., BRITO, M. G., SOARES, A. & ZUNGALIA, E. (1997) - Stochastic Simulation of Sediment Quality for Dredging project. In Pawlowsky Glahn, V. (Ed.), IAMG'97 – 3rd Annual Conf. Intern. Assoc. Mathematical Geology; Barcelona, Part II, pp. 899-904.
- PEREIRA, H. G., BRITO, M. G., ALBUQUERQUE, T. & RIBEIRO, J. (1992) - Geostatistical Estimation of a Summary Recovery Index for Marble Quarries. In Soares, A. (Ed.), Geostatistics Troia 92, IV Intern. Geost. Congr., Kluwer Acad. Publish., Dordrecht, vol. 2, pp. 1029 - 1040.
- PEREIRA, H. G., ALBUQUERQUE, T., RIBEIRO, J., SOUSA, A. J. & BRITO, G. (1994) - Estimacão geoestatística de um índice de qualidade em rochas ornamentais. Geosistemas,. Lisboa, n. 3, pp. 101-107.
- PETTS, J., CAIRNEY, T. & SMITH, M., (1997) - Risk-Based Contaminated land Investigation and Assessment, John Wiley & Sons, New York.



- RIBEIRO, L. T. & MUGE, F. H. (1989) - A Geostatistical Approach to the Modelling of a Piezometric Field. In Armstrong, M. (ed.), Geostatistics. Kluwer Academic Publish., Dordrecht, pp. 651-660.
- SHARMA, H. D.; REDDY, K. R. (2004) - Geoenvironmental Engineering: Site Remediation, Waste Containment, and Emerging Waste Management Technologies, 992 p.
- SOARES, A. (2000) – Geoestatística para as Ciências da Terra e do Ambiente. Coleção: Ensino da Ciência e Tecnologia, IST Press, Lisboa.
- SOBRINHO, M., (2006) - Aplicação de uma Metodologia para a Avaliação da Contaminação de Solos de uma Área Industrial. Relatório de Estágio, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa.
- US EPA (1989) – Risk Assessment Guidance for a Superfund Volume I Human Health Evaluation Manual (Part A). Report no. EPA 540/1-89/002, /United States Environmental Protection Agency, Washington DC, 1989.
- VENDAS D.F.; C.N. COSTA; M.G. BRITO (2007) – Risk Assessment for redevelopment of Contaminated Land at an Old Industrial Site. Proceedings of the 5th WSEAS International Conference on Environment, Ecosystems and Development (EED'07). Puerto de La Cruz, Tenerife. WSEAS press. ISBN: 978-960-6766-20-6, ISSN: 1790-5095. 363-367pp.
- WATERLOO HYDROGEOLOGIC (2001) – RISC WorkBench User's Manual, Human Health Risk Assessment Software for Contaminated Sites. Waterloo, 1 vol.

## APÊNDICE I

## Apêndice I A

## Concentrações das Amostras – Nível A

Amostra	Profundidade (m)	Elementos Químicos (mg/kg)			
		As	Cu	Pb	Zn
S01	1.50	1.5	13	17	28
S02	1.50	1.5	14	8	95
S03	1.50	32	450	41	350
S04	1.50	5	35	20	59
S05	1.50	11	270	9	480
S06	1.50	4	6	11	27
S07	1.50	59	8	3	17
S08	1.50	1.5	5	14	22
S09	1.50	11	39	27	22
S10	1.50	1.5	1.5	1.5	11
S11	1.50	1.5	4	11	18
S12	1.50	46	290	240	480
S13	1.50	1.5	10	11	160
S14	1.50	24	130	77	220
S15	1.50	1.5	4	5	48
S16	1.50	1.5	6	4	18
S17	1.50	5	4	9	19
S18	1.50	14	30	27	110
S19	1.50	130	32	490	49
S20	1.50	6	29	15	19
S21	1.50	28	6	8	5
S22	1.50	5	19	26	32
S23	1.50	1.5	5	9	5
S24	1.50	1.5	4	7	10
S25	1.50	1.5	1.5	4	12
S26	1.50	9	17	5	22
S27	1.20	39	6	5	5
S28	1.00	41	13	15	5
S29	1.10	1.5	4	12	10
S30	1.10	1.5	5	10	5
S31	1.45	7	19	9	61
S32	0.60	3	10	21	11
S33	1.40	38	7	4	25
S34	1.20	180	5	25	5
S35	0.80	340	7	120	5
S36	1.00	670	36	23	44
S37	0.90	120	9	4	5
S38	0.80	130	7	1.5	60
S39	0.40	1.5	9	4	5
S40	1.40	10	15	11	33
S41	0.80	20	1.5	1.5	5
S42	0.80	1.5	7	11	5
S43	1.50	3	1.5	1.5	5
S44	1.40	1.5	4	6	5

Amostra	Profundidade (m)	Elementos Químicos (mg/kg)			
		As	Cu	Pb	Zn
S45	0.40	1.5	1.5	4	5
S46	0.80	1.5	4	1.5	18
S47	0.50	1.5	130	6	720
S48	0.70	1.5	1.5	1.5	20
S49	1.50	1.5	1.5	5	5
S50	0.50	1.5	1.5	5	5
S51	0.70	16	1.5	6	5
S52	1.00	3	29	11	18
S53	0.80	1.5	14	7	23
S54	0.80	1.5	10	9	5
S55	1.30	610	120	32	65
S56	1.40	75	37	6	25

**NOTA:** As células evidenciadas a azul representam as amostras que apresentam teores do elemento químico superiores ao limite de referência (LR) estabelecido pelas normas canadianas de Ontário.

LR do Arsénio (As): 40mg/kg;

LR do Cobre (Cu): 225mg/kg;

LR do Chumbo (Pb): 1000mg/kg;

LR do Zinco (Zn): 600mg/kg;

## Apêndice I B

## Concentrações das Amostras – Nível B

Amostra	Profundidade (m)	Elementos Químicos (mg/kg)			
		As	Cu	Pb	Zn
S01	3.00	8	1300	1.5	1300
S02	3.00	14	4000	15	20000
S03	3.00	5	27	74	320
S04	3.00	4	88	6	600
S05	3.00	53	150	29	230
S06	3.00	100	24	41	5500
S07	3.00	5	7	10	20
S08	3.00	310	24	4	32
S09	3.00	1.5	87	5	130
S10	3.00	11	24	28	82
S11	3.00	1.5	4	4	24
S12	3.00	1.5	1.5	3	5
S13	3.00	1.5	3	5	5
S14	3.00	32	78	1.5	54
S15	3.00	15	750	23	490
S16	3.00	13	37	43	150
S17	3.00	4	1.5	1.5	25
S18	3.00	1.5	1.5	4	14
S19	3.00	1.5	1.5	1.5	5
S20	3.00	9	20	20	89
S21	3.00	8	3	10	5
S22	3.00	9	13	6	37
S23	3.00	35	90	110	5200
S24	3.00	11	11	20	1800
S25	3.00	10	8	10	11
S26	3.00	3	3	6	5
S27	3.00	15	32	31	90
S28	3.00	1.5	1.5	1.5	5
S29	3.00	1.5	1.5	4	15
S30	3.00	18	45	11	25
S31	1.90	1.5	29	1.5	33
S32	2.70	1.5	44	12	28
S33	2.70	11	160	13	330
S34	2.40	1.5	31	1.5	52
S35	2.40	92	320	29	100
S36	2.20	6	640	1.5	1800
S37	2.50	180	100	12	26
S38	2.90	4	81	1.5	260
S39	2.00	700	770	37	480
S40	2.10	5	450	9	130
S41	2.80	1.5	39	48	22
S42	1.60	36	35	8	1400
S43	2.00	31	140	110	200
S44	1.80	13	41	23	36

Amostra	Profundidade (m)	Elementos Químicos (mg/kg)			
		As	Cu	Pb	Zn
S45	2.40	190	230	1.5	690
S46	1.70	31	62	26	22
S47	1.80	8	14	13	64
S48	2.60	140	130	41	150
S49	2.20	11	11	1.5	15
S50	2.90	8	18	20	71
S51	2.60	14	23	25	82
S52	1.80	8	110	22	360
S53	1.90	12	21	25	4400
S54	1.80	150	19	4	41
S55	2.30	170	16	8	32
S56	1.60	650	22	14	30
S57	2.10	690	48	40	110
S58	2.00	130	7	11	12
S59	1.60	22	88	30	150
S60	1.80	140	6	4	5
S61	1.60	1.5	49	1.5	26
S62	2.10	1.5	1.5	1.5	5
S63	2.10	23	5	8	5
S64	2.00	1.5	1.5	8	5
S65	2.60	4	18	29	41
S66	2.00	1.5	4	8	5
S67	2.80	4	4	6	5
S68	2.40	6	15	10	150
S69	2.10	1.5	6	7	23
S70	2.50	1.5	1.5	28	19
S71	2.20	14	5	9	48
S72	2.60	5	10	12	24
S73	2.50	1.5	1.5	6	21
S74	2.20	1.5	8	7	5
S75	1.70	15	5	9	200
S76	2.70	12	17	28	860
S77	2.40	45	26	68	910

**NOTA:** As células evidenciadas a azul representam as amostras que apresentam teores do elemento químico superiores ao limite de referência (LR) estabelecido pelas normas canadianas de Ontário.

LR do Arsénio (As): 40mg/kg;

LR do Cobre (Cu): 225mg/kg;

LR do Chumbo (Pb): 1000mg/kg;

LR do Zinco (Zn): 600mg/kg;

## Apêndice I C

## Concentrações das Amostras – Nível C

Amostra	Profundidade (m)	Elementos Químicos (mg/kg)			
		As	Cu	Pb	Zn
S01	4.50	3	110	1.5	1000
S02	4.50	8	2500	7	1400
S03	4.50	11	52	4	57
S04	4.50	1.5	14	3	81
S05	4.50	26	520	340	860
S06	4.50	230	96	95	220
S07	4.50	16	25	23	41
S08	4.50	1.5	1.5	3	5
S09	4.50	1.5	3	4	22
S10	4.50	1.5	1.5	4	5
S11	4.50	1.5	1.5	1.5	5
S12	4.50	1.5	1.5	1.5	5
S13	4.50	140	290	5	16000
S14	4.50	1.5	3000	1.5	6300
S15	4.50	5	16	1.5	300
S16	4.50	3	1.5	6	16
S17	4.50	1.5	7	8	11
S18	4.50	5	1.5	1.5	14
S19	4.50	110	360	110	48
S20	4.50	1900	240	4700	400
S21	4.50	54	330	190	2800
S22	4.50	1.5	11	15	15
S23	4.50	1.5	3	8	5
S24	4.50	7	7	9	20
S25	4.50	1.5	5	4	5
S26	4.50	1.5	1.5	4	5
S27	3.10	610	150	73	41
S28	3.30	5	3800	1.5	1600
S29	3.10	12	30	4	44
S30	3.70	1.5	93	5	33
S31	3.90	20	210	6	330
S32	3.10	12	3	4	15
S33	3.40	14	14	14	69
S34	3.50	1.5	160	8	32
S35	3.50	1.5	1.5	6	69

**NOTA:** As células evidenciadas a azul representam as amostras que apresentam teores do elemento químico superiores ao limite de referência (LR) estabelecido pelas normas canadianas de Ontário.

LR do Arsénio (As): 40mg/kg;

LR do Cobre (Cu): 225mg/kg;

LR do Chumbo (Pb): 1000mg/kg;

LR do Zinco (Zn): 600mg/kg;

## APÊNDICE II



**CÓDIGO 1 – *Rescalling* dos valores negativos estimados por KN**

**Rotina 1 - Transforma os valores negativos de ZN estimados por KN no valor zero**

**Private Sub Command1\_Click()**

**Rem: Abertura dos ficheiros**

Open "D:\LUISA\DADOS\KN\KN\_ZINCO.OUT" For Input As #1

Open "D:\LUISA\DADOS\KN\RESCALE\_KN\_ZINCO.OUT" For Output As #2

**Rem: Transformação dos valores negativos em zero**

While Not EOF (1)

Input #1, valor

If valor < 0 Then valor = 0

Print #2, valor

Wend

Close

End Sub

End

## CÓDIGO 2 – RISCO E PERIGOSIDADE PARA TEORES ZN ESTIMADOS POR KN

### Rotina 2 - Calcula o Risco e Perigosidade para os teores Zn estimados

*Private Sub cmd\_risco\_ZN\_Click()*

#### Rem: Abertura dos ficheiros

Open " D:\LUIA\DADOS\KN\OUT\KN\_ZINCO.OUT" For Input As #1

Open " D:\LUIA\DADOS\KN\OUT\KN\_RISCO.OUT" For Output As #2

#### Rem: Descrição dos parâmetros de risco

Rem CR - contact/ingestion rate for exposure pathway (mg/day)

Rem EF - exposure frequency (days/year)

Rem ED - exposure duration (years)

Rem BW - body weight (kg)

Rem LT - Life time (days)

Rem SF - Slope Factor (1/(mg/kg-d))

Rem RfD - oral chronic reference dose (mg/kg-d)

Rem AAF - Chemical-specific oral soil absorption adjustment factor (mg/mg)

Rem BIO - Bioavailability of chemical in soil (mg/mg)

#### Rem: Fórmulas de cálculo de valor de risco cancerígeno e de perigosidade por ingestão de solo

Rem intake\_cancer = (valor \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

Rem intake\_hazard = (valor \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

#### Rem: Atribuição de valores aos parâmetros de risco

CR = 40      'adulto

EF = 40      'adulto

ED = 9      'adulto

BW = 70      'adulto

LT = 70      'adulto

SF = 1      'zinco

RfD = 0.3      'zinco

AAF = 1      'zinco

BIO = 1      'zinco

**CÓDIGO 2 – RISCO E PERIGOSIDADE PARA TEORES ZN ESTIMADOS POR KN**

**Rotina 2 - Cálculo o Risco e Perigosidade para os teores Zn estimados (continuação)**

**Rem: Cálculo do Risco Cancerígeno e da Perigosidade para cada teor estimado KN**

*While Not EOF(1)*

intake\_cancer = 0

intake\_hazard = 0

risk\_cancer = 0

risk\_hazard = 0

risk\_cancer\_bin = 0

risk\_hazard\_bin = 0

*Input #(1), valor*

If valor < 0 Then valor = 0

intake\_cancer = (valor \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

intake\_hazard = (valor \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

risk\_cancer = intake\_cancer \* SF

risk\_hazard = intake\_hazard / RfD

*IF risk\_cancer >= 0.000001 THEN risk\_cancer\_bin = 1 ELSE risk\_cancer\_bin = 0*

*IF risk\_hazard >= 1 THEN risk\_hazard\_bin = 1 ELSE risk\_hazard\_bin = 0*

risk\_cancer = risk\_cancer \* 100000000

risk\_hazard = risk\_hazard \* 100000000

Print #2, risk\_cancer; risk\_hazard; risk\_cancer\_bin; risk\_hazard\_bin

*Wend*

MsgBox "valor = " & CStr(valor) & vbNewLine & \_

"(RC) risk\_cancer = " & CStr(risk\_cancer) & vbNewLine & \_

"(P) risk\_hazard = " & CStr(risk\_hazard)

MsgBox "completo Risco"

Close

*End Sub*

**Rem: Botão de saída da rotina**

Private Sub cmd\_sair\_Click()

End

End Sub

### CÓDIGO 3 – RISCO E PERIGOSIDADE PARA TEORES ZN NAS AMOSTRAS

#### Rotina 3 - Calcula o Risco e a Perigosidade para os teores Zn das amostras de solo

#### Rem - Cálculo do Risco e Perigosidade por Ingestão de Solo para os teores de Zn nas amostras

*Private Sub cmd\_risco\_ZN\_Click()*

#### Rem: Abertura dos ficheiros

Open "D:\LUISA\DADOS\NÍVEL\_A.prn" For Input As #1

Open "D:\LUISA\DADOS\RISCO\_ZN\_AMOSTRAS.prn" For Output As #2

#### Rem: Descrição dos parâmetros de risco

Rem CR - contact/ingestion rate for exposure pathway (mg/day)

Rem EF - exposure frequency (days/year)

Rem ED - exposure duration (years)

Rem BW - body weight (kg)

Rem LT - Life time (days)

Rem SF - Slope Factor (1/(mg/kg-d))

Rem RfD - oral chronic reference dose (mg/kg-d)

Rem AAF - Chemical-specific oral soil absorption adjustment factor (mg/mg)

Rem BIO - Bioavailability of chemical in soil (mg/mg)

#### Rem: Fórmulas de cálculo de valor de risco cancerígeno e de perigosidade por ingestão de solo

Rem intake\_cancer = (valor \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

Rem intake\_hazard = (valor \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

#### Rem: Atribuição de valores aos parâmetros de risco

CR = 40 'adulto

EF = 40 'adulto

ED = 9 'adulto

BW = 70 'adulto

LT = 70 'adulto

SF = 1 'zinco

RfD = 0.3 'zinco

AAF = 1 'zinco

BIO = 1 'zinco

**CÓDIGO 3 – RISCO E PERIGOSIDADE PARA TEORES ZN NAS AMOSTRAS**

**Rotina 3 - Calcula o Risco e Perigosidade para os amostras de Zn (continuação)**

**Rem: Cálculo do Risco Cancerígeno e da Perigosidade para teor Zn em cada amostra**

*While Not EOF(1)*

intake\_cancer = 0

intake\_hazard = 0

risk\_cancer = 0

risk\_hazard = 0

risk\_cancer\_bin = 0

risk\_hazard\_bin = 0

*Input #(1), x, y, z, a, b, c, valor*

intake\_cancer = (valor \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

intake\_hazard = (valor \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

risk\_cancer = intake\_cancer \* SF

risk\_hazard = intake\_hazard / RfD

*IF risk\_cancer >= 0.000001 THEN risk\_cancer\_bin = 1 ELSE risk\_cancer\_bin = 0*

*IF risk\_hazard >= 1 THEN risk\_hazard\_bin = 1 ELSE risk\_hazard\_bin = 0*

risk\_cancer = risk\_cancer \* 100000000

risk\_hazard = risk\_hazard \* 100000000

*Print #2, x, y, risk\_cancer, risk\_hazard, risk\_cancer\_bin, risk\_hazard\_bin*

*Wend*

MsgBox "valor = " & CStr(valor) & vbNewLine & \_

    " risk\_cancer = " & CStr(risk\_cancer) & vbNewLine & \_

    "risk\_hazard = " & CStr(risk\_hazard) & vbNewLine & \_

    "amostra " & CStr(i)

MsgBox "completo ZN"

*Close*

*End Sub*

**Rem: Botão de saída da rotina**

*Private Sub cmd\_sair\_Click()*

*End*

*End Sub*

# **CÓDIGO 4 – RECODIFICACAO DOS VALORES DE RISCO BINARIZADOS**

## **ROTINA 4 –RECODIFICAÇÃO DOS VALORES DE RISCO ESTIMADOS POR KI APÓS BINARIZAÇÃO**

**Rem: Recodificacao dos valores de risco binarizados**

*Private Sub cmd\_recod\_risco\_SSG\_Click()*

**Rem - abertura dos ficheiros**

Open "D:\LUISA\DADOS\KI\_RISCO\KI\_BIN\_RC" + ".OUT" For Input As #1

Open "D:\LUISA\DADOS\KI\_RISCO\RECOD\_KI\_BIN\_RC" + ".OUT" For Output As #2

**Rem: ciclo de leitura dos valores estimado de risco binarizados e recodificação**

*While Not EOF(1)*

Input #(1), valor

*IF* valor = 2 *THEN* codigo = 0

*IF* valor = 1 *THEN* codigo = 1

*IF* valor = -9999 *THEN* codigo = -9999

Print #2, codigo

*Wend*

*Close*

MsgBox "completo recodificacao KI\_BIN\_RC"

*End Sub*

*End*

**CÓDIGO 5 – CÁLCULO DA MÉDIA DOS TEORES ZN SIMULADOS POR SSG**

**Rotina 5 – Calcula a média dos 500 cenários dos teores de Zn simulados por SSG**

*Private Sub cmd\_media\_zn\_Click()*

**Rem: Abertura dos 500 ficheiros de teores Zn Simulados por SSG**

*For i = 1 To 500*

Open "D:\LUIZA\DADOS\SSG\_500\SSG" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

*Next i*

**Rem: Abertura do ficheiro de Output para os teores médios**

Open "D:\LUIZA\DADOS\SSG\_500\_MEDIA\SSG\_500\_MEDIA" + ".OUT" For Output As #501

**Rem: Ciclo de leitura dos 500 cenários teores simulados por SSG e cálculo da média**

*While Not EOF(1)*

valor = 0

soma\_teores = 0

media\_teores\_ZN = 0

*For i = 1 To 500*

Input #(i), VALOR

soma\_teores = soma\_teores + valor

*Next i*

media\_teores\_ZN = soma\_teores / 500

*Print #501, media\_teores\_ZN*

*Wend*

MsgBox "completo média teores ZN SSG"

Close

End Sub

**CÓDIGO 6 – CÁLCULO DO RISCO OS 500 CENÁRIOS DE TEORES ZN SIMULADOS POR SSG**

**Rotina 6 - Calcula o Risco para os 500 cenários de teores Zn simulados por SSG**

**Rem – Definição dos parâmetros para o cálculo de risco e perigosidade**

Rem CR - contact/ingestion rate for exposure pathway (mg/day)

Rem EF - exposure frequency (days/year)

Rem ED - exposure duration (years)

Rem BW - body weight (kg)

Rem LT - Life time (days)

Rem SF - Slope Factor (1/(mg/kg-d))

Rem RfD - oral chronic reference dose (mg/kg-d)

Rem AAF - Chemical-specific oral soil absorption adjustment factor (mg/mg)

Rem BIO - Bioavailability of chemical in soil (mg/mg)

**Rem – Apresentação das fórmulas para o cálculo de risco e perigosidade**

Rem intake\_cancer = (valor \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

Rem intake\_hazard = (valor \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

*Private Sub cmd\_risco\_ZN\_Click()*

**Rem: Abertura dos ficheiros SSG 1 a 250**

*For i = 1 To 250*

Open "D:\LUIA\Dados\SSG\_500\SSG" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

Open "D:\LUIA\Dados\SSG\_500\_RISCO\SSG\_1\_250\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Output As #250 + (i)

*Next i*

**Rem: Atribuição de valores aos parâmetros de risco**

CR = 40 'adulto

EF = 40 'adulto

ED = 9 'adulto

BW = 70 'adulto

LT = 70 'adulto

SF = 1 'zinco

RfD = 0.3 'zinco

AAF = 1 'zinco

BIO = 1 'zinco



**CÓDIGO 6 – CÁLCULO DO RISCO PARA OS 500 CENÁRIOS DE TEORES ZN SIMULADOS POR SSG**

**Rotina 6 - Calcula o Risco para os 500 cenários de teores Zn simulados por SSG (continuação)**

**Rem: Ciclo para cálculo do risco para os cenários SSG 1 a 250**

*While Not EOF(1)*

intake\_cancer = 0

intake\_hazard = 0

risk\_cancer = 0

risk\_hazard = 0

risk\_cancer\_bin = 0

risk\_hazard\_bin = 0

*For i = 1 To 250*

Input #(i), VALOR

intake\_cancer = (VALOR \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

intake\_hazard = (VALOR \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

risk\_cancer = intake\_cancer \* SF

risk\_hazard = intake\_hazard / RfD

If risk\_cancer >= 0.000001 Then risk\_cancer\_bin = 1 Else risk\_cancer\_bin = 0

If risk\_hazard >= 1 Then risk\_hazard\_bin = 1 Else risk\_hazard\_bin = 0

Print #250 + (i), risk\_cancer, risk\_hazard, risk\_cancer\_bin, risk\_hazard\_bin

*Next i*

*Wend*

Close

# **CÓDIGO 6 – CÁLCULO DO RISCO PARA OS 500 CENÁRIOS DE TEORES ZN SIMULADOS POR SSG**

## **Rotina 6 - Calcula do Risco para os 500 cenários de teores Zn simulados por SSG (continuação)**

### **Rem: Abertura dos ficheiros SSG 251 a 500**

*For i = 251 To 500*

Open "D:\LUISA\DADOS\SSG\_500\SSG" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

Open "D:\LUISA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\SSG\_251\_500\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Output As #(i) - 250

*Next i*

### **Rem: Ciclo para cálculo do risco para os cenários SSG 251 a 500**

*While Not EOF(251)*

intake\_cancer = 0

intake\_hazard = 0

risk\_cancer = 0

risk\_hazard = 0

risk\_cancer\_bin = 0

risk\_hazard\_bin = 0

*For i = 500 To 251 Step -1*

Input #(i), VALOR

intake\_cancer = (VALOR \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \* 0.000001

intake\_hazard = (VALOR \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

risk\_cancer = intake\_cancer \* SF

risk\_hazard = intake\_hazard / RfD

If risk\_cancer >= 0.000001 Then risk\_cancer\_bin = 1 Else risk\_cancer\_bin = 0

If risk\_hazard >= 1 Then risk\_hazard\_bin = 1 Else risk\_hazard\_bin = 0

Print #(i) - 250, risk\_cancer, risk\_hazard, risk\_cancer\_bin, risk\_hazard\_bin

*Next i*

Wend

MsgBox "SSG 251 a 500 - valor = " & CStr(VALOR) & vbNewLine & \_

"RISK\_CANCER = " & CStr(risk\_cancer) & vbNewLine & \_

"risk\_hazard = " & CStr(risk\_hazard)

MsgBox "completo Risco SSG 251 a 500"

Close

End Sub

## CÓDIGO 7 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSG)

### Rotina 7 - Calcula a probabilidade de Risco (média dos 500 cenários de risco SSG)

Private Sub cmd\_Prob\_risco\_ZN\_Click()

**Rem: Cálculo do *mapa médio* SSG 1 a 250 – ou mapa de probabilidades**

**Rem: leitura dos ficheiros SSG 1 a 250 e abertura do ficheiro de output**

*For i = 1 To 250*

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\SSG\_1\_250\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

*Next i*

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\MEDIA\_SSG\_1\_250\_RISCO" + ".OUT" For Output As #501

**Rem: Ciclo para cálculo da média de risco para os cenários SSG 1 a SSG 250**

*While Not EOF(1)*

valor1 = 0

valor2 = 0

BIN\_cancer = 0

BIN\_hazard = 0

soma\_BIN\_cancer = 0

soma\_BIN\_hazard = 0

media\_BIN\_cancer = 0

media\_BIN\_hazard = 0

*For i = 1 To 250*

Input #(i), valor1, valor2, BIN\_cancer, BIN\_hazard

soma\_BIN\_cancer = soma\_BIN\_cancer + BIN\_cancer

soma\_BIN\_hazard = soma\_BIN\_hazard + BIN\_hazard

*Next i*

media\_BIN\_cancer = (soma\_BIN\_cancer / 250)

media\_BIN\_hazard = (soma\_BIN\_hazard / 250)

Rem Print #501, media\_BIN\_cancer, media\_BIN\_hazard

Print #501, media\_BIN\_cancer

*Wend*

MsgBox "completo SSG 1 a 250"

*Close*

## CÓDIGO 7 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSG)

### Rotina 7 - Calcula a probabilidade de Risco (continuação)

**Rem:** Cálculo do mapa médio SSG 251 a 500 – ou mapa de probabilidades

**Rem:** Ciclo de leitura dos ficheiros SSG 251 a 500 e abertura do ficheiro de output

*For i = 500 To 251 Step -1*

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\SSG\_251\_500\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #i)

*Next i*

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\MEDIA\_SSG\_251\_500\_RISCO" + ".OUT" For Output As #502

**Rem:** Ciclo para cálculo de risco dos teores simulados SSG 251 a 500

*While Not EOF(251)*

valor1 = 0

valor2 = 0

BIN\_cancer = 0

BIN\_hazard = 0

soma\_BIN\_cancer = 0

soma\_BIN\_hazard = 0

media\_BIN\_cancer = 0

media\_BIN\_hazard = 0

*For i = 500 To 251 Step -1*

Input #i), valor1, valor2, BIN\_cancer, BIN\_hazard

soma\_BIN\_cancer = soma\_BIN\_cancer + BIN\_cancer

soma\_BIN\_hazard = soma\_BIN\_hazard + BIN\_hazard

*Next i*

media\_BIN\_cancer = (soma\_BIN\_cancer / 250)

media\_BIN\_hazard = (soma\_BIN\_hazard / 250)

Print #502, media\_BIN\_cancer

*Wend*

MsgBox "completo SSG 251 a 500"

Close

## CÓDIGO 7 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSG)

### Rotina 7 - Calcula a probabilidade de Risco (continuação)

**Rem: Cálculo da probabilidade de risco para os 500 cenários SSG (Média SSG (1 a 250) e SSG (251 a 500))**

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\MEDIA\_SSG\_1\_250\_RISCO" + ".OUT" For Input As #1

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\MEDIA\_SSG\_251\_500\_RISCO" + ".OUT" For Input As #2

Open "D:\LUIA\DADOS\SSG\_500\_RISCO\PROB\_SSG\_500\_RISCO" + ".OUT" For Output As #3

**Rem: Média da média parcial dos ficheiros SSG(1 a 250) e SSG(251 a 500)**

*While Not EOF(1)*

BIN\_cancer = 0

BIN\_hazard = 0

soma\_BIN\_cancer = 0

soma\_BIN\_hazard = 0

media\_BIN\_cancer = 0

media\_BIN\_hazard = 0

*For i = 1 To 2*

Input #(i), BIN\_cancer

soma\_BIN\_cancer = soma\_BIN\_cancer + BIN\_cancer

Rem soma\_BIN\_hazard = soma\_BIN\_hazard + BIN\_hazard

*Next i*

media\_BIN\_cancer = (soma\_BIN\_cancer / 2)

Rem media\_BIN\_hazard = (soma\_BIN\_hazard / 2)

Print #3, media\_BIN\_cancer

*Wend*

MsgBox "Prob Risco SSG(1 a 500)=" & CStr(media\_BIN\_cancer)

MsgBox "Mapa Prob Risco Cancer SSG"

*Close*

MsgBox "Completo probabilidade de Risco SSG"

*End Sub*

## CÓDIGO 8 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSI)

### Rotina 8 – Calcula a probabilidade de Risco dos 500 cenários SSI

Private Sub cmd\_Prob\_risco\_ZN\_Click()

**Rem: Cálculo do *mapa médio* SSI 1 a 250 – ou mapa de probabilidades**

**Rem: leitura dos ficheiros SSI 1 a 250 e abertura do ficheiro de output**

For I = 1 To 250

Open "D:\LUIA\DADOS\SSI\_500\_RISCO\SSI\_1\_250\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

Next i

Open "D:\LUIA\DADOS\SSI\_500\_RISCO\MEDIA\_SSI\_1\_250\_RISCO" + ".OUT" For Output As #501

**Rem: Ciclo para cálculo da média de risco para os cenários SSI 1 a SSI 250**

While Not EOF(1)

valor1 = 0

valor2 = 0

BIN\_cancer = 0

BIN\_hazard = 0

soma\_BIN\_cancer = 0

soma\_BIN\_hazard = 0

media\_BIN\_cancer = 0

media\_BIN\_hazard = 0

For I = 1 To 250

Input #(i), valor1, valor2, BIN\_cancer, BIN\_hazard

soma\_BIN\_cancer = soma\_BIN\_cancer + BIN\_cancer

soma\_BIN\_hazard = soma\_BIN\_hazard + BIN\_hazard

Next i

media\_BIN\_cancer = (soma\_BIN\_cancer / 250)

media\_BIN\_hazard = (soma\_BIN\_hazard / 250)

Rem Print #501, media\_BIN\_cancer, media\_BIN\_hazard

Print #501, media\_BIN\_cancer

Wend

MsgBox "106omplete SSI 1 a 250"

Close

**CÓDIGO 8 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSI)**

**Rotina 8 – Calcula a probabilidade de Risco dos 500 cenários SSI (continuação)**

**Rem: Abertura dos ficheiros SSI 251 a 500**

*For i = 251 To 500*

Open "D:\LUIA\Dados\SSI\_500\SSI" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For Input As #(i)

Open "D:\LUIA\Dados\SSI\_500\_RISCO\SSI\_251\_500\_RISCO" + Trim\$(Str\$(i)) + ".OUT" For  
Output As #(i) - 250

*Next i*

**Rem: Ciclo para cálculo do risco para os cenários SSI 251 a 500**

*While Not EOF(251)*

intake\_cancer = 0

intake\_hazard = 0

risk\_cancer = 0

risk\_hazard = 0

risk\_cancer\_bin = 0

risk\_hazard\_bin = 0

*For i = 500 To 251 Step -1*

Input #(i), VALOR

intake\_cancer = (VALOR \* ((CR \* AAF \* EF \* ED \* BIO) / BW) \* (1 / (LT \* 365))) \*  
0.000001

intake\_hazard = (VALOR \* (((CR \* AAF \* EF \* BIO) / BW) \* (1 / 365))) \* 0.000001

risk\_cancer = intake\_cancer \* SF

risk\_hazard = intake\_hazard / RfD

If risk\_cancer >= 0.000001 Then risk\_cancer\_bin = 1 Else risk\_cancer\_bin = 0

If risk\_hazard >= 1 Then risk\_hazard\_bin = 1 Else risk\_hazard\_bin = 0

Print #(i) - 250, risk\_cancer, risk\_hazard, risk\_cancer\_bin, risk\_hazard\_bin

*Next i*

*Wend*

MsgBox "SSG 251 a 500 - valor = " & CStr(VALOR) & vbNewLine & \_

"RISK\_CANCER = " & CStr(risk\_cancer) & vbNewLine & \_

"risk\_hazard = " & CStr(risk\_hazard)

MsgBox "completo Risco SSI 251 a 500"

Close

End Sub

## CÓDIGO 8 – CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE RISCO (SSI)

### Rotina 8 - Calcula a probabilidade de Risco (continuação)

**Rem:** Cálculo da probabilidade de risco para os 500 cenários SSI (Média SSI (1 a 250) e SSI(251 a 500))

Open "D:\LUIA\DADOS\SSI\_500\_RISCO\MEDIA\_SSI\_1\_250\_RISCO" + ".OUT" For Input As #1

Open "D:\LUIA\DADOS\SSI\_500\_RISCO\MEDIA\_SSI\_251\_500\_RISCO" + ".OUT" For Input As #2

Open "D:\LUIA\DADOS\SSI\_500\_RISCO\PROB\_SSI\_500\_RISCO" + ".OUT" For Output As #3

**Rem:** Média da média parcial dos ficheiros SSI(1 a 250) e SSI(251 a 500)

*While Not EOF(1)*

BIN\_cancer = 0

BIN\_hazard = 0

soma\_BIN\_cancer = 0

soma\_BIN\_hazard = 0

media\_BIN\_cancer = 0

media\_BIN\_hazard = 0

*For i = 1 To 2*

Input #(i), BIN\_cancer

soma\_BIN\_cancer = soma\_BIN\_cancer + BIN\_cancer

Rem soma\_BIN\_hazard = soma\_BIN\_hazard + BIN\_hazard

*Next i*

media\_BIN\_cancer = (soma\_BIN\_cancer / 2)

Rem media\_BIN\_hazard = (soma\_BIN\_hazard / 2)

Print #3, media\_BIN\_cancer

*Wend*

MsgBox "Prob Risco SSI(1 a 500)= " & CStr(media\_BIN\_cancer)

MsgBox "Mapa Prob Risco Cancer SSI"

*Close*

MsgBox "Completo probabilidade de Risco SSI"

*End Sub*